```
data_lach20m

_publ_section_comment
;
One of the NBu4 cations is near a symmetry element, causing the
cation to be too close to its
symmetry equivalent, this means that either one of the alkyl chains
is not in the correct
position or that the cation is disordered over the two sites, this
causes some of the atoms to
have short intermolecular contacts.
A cobalt ion with six DMF molecules is present in the structure, this
is disordered over two
symmetry equivalent sites.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)5Co[SiW9O34(H3CCOC6H4PO)3][Co
((H3C)2NCOH)6]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C157 H280 Co2 N15 O90 P6 Si2 W18'
_chemical_formula_weight          7487.12

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Co'  'Co'  -2.3653   3.6143
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'C 2/c'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x, y, -z+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 '-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
 '-x, -y, -z'
 'x, -y, z-1/2'
 '-x+1/2, -y+1/2, -z'
 'x+1/2, -y+1/2, z-1/2'
```

```
_cell_length_a                    22.0375(13)
_cell_length_b                    31.3129(19)
_cell_length_c                    33.7086(19)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  91.085(3)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      23257(2)
_cell_formula_units_Z             4
_cell_measurement_temperature     293(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       2.5
_cell_measurement_theta_max       56.0

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           0.12
_exptl_crystal_size_mid           0.08
_exptl_crystal_size_min           0.06
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.138
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              14204
_exptl_absorpt_coefficient_mu     18.226
_exptl_absorpt_correction_type    multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min   0.2184
_exptl_absorpt_correction_T_max   0.4077
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       293(2)
_diffrn_radiation_wavelength      1.54178
_diffrn_radiation_type            CuK\a
_diffrn_radiation_source          'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method        'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             71703
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0688
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0624
_diffrn_reflns_limit_h_min        -23
_diffrn_reflns_limit_h_max        23
_diffrn_reflns_limit_k_min        -33
_diffrn_reflns_limit_k_max        31
_diffrn_reflns_limit_l_min        -35
_diffrn_reflns_limit_l_max        36
_diffrn_reflns_theta_min          2.45
_diffrn_reflns_theta_max          56.04
_reflns_number_total              14651
_reflns_number_gt                 11003
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        SMART
_computing_cell_refinement        SAINTPLUS
_computing_data_reduction         SAINTPLUS
_computing_structure_solution     SHELXTL
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
```

```
_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0549P)^2^+859.6679P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          14651
_refine_ls_number_parameters      1091
_refine_ls_number_restraints      235
_refine_ls_R_factor_all           0.0748
_refine_ls_R_factor_gt            0.0489
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1356
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1198
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.027
_refine_ls_restrained_S_all       1.092
_refine_ls_shift/su_max           0.148
_refine_ls_shift/su_mean          0.005

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.7829(7) 0.1180(5) 0.0401(4) 0.032(4) Uani 1 1 d . . .
C2 C 0.7931(9) 0.0741(6) 0.0473(5) 0.054(5) Uani 1 1 d . . .
H2 H 0.7956 0.0548 0.0263 0.065 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.7790(8) 0.1447(5) 0.0718(4) 0.044(4) Uani 1 1 d . . .
H3 H 0.7722 0.1736 0.0672 0.053 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.7993(10) 0.0604(6) 0.0861(5) 0.070(6) Uani 1 1 d . . .
H4 H 0.8063 0.0315 0.0910 0.084 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.7846(9) 0.1303(6) 0.1107(5) 0.057(5) Uani 1 1 d . . .
H5 H 0.7811 0.1491 0.1318 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.7956(11) 0.0873(6) 0.1173(5) 0.065(6) Uani 1 1 d . . .
```

C7 C 0.8046(16) 0.0727(9) 0.1593(7) 0.116(11) Uani 1 1 d . . .
C8 C 0.9051(7) 0.3199(5) -0.0480(4) 0.035(4) Uani 1 1 d U . .
C8A C 0.8053(16) 0.1027(7) 0.1925(5) 0.139(14) Uani 1 1 d . . .
H8A1 H 0.8129 0.0874 0.2168 0.208 Uiso 1 1 calc R . .
H8A2 H 0.7668 0.1169 0.1937 0.208 Uiso 1 1 calc R . .
H8A3 H 0.8368 0.1234 0.1888 0.208 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.9565(10) 0.3369(7) -0.0664(6) 0.081(8) Uani 1 1 d . . .
H9 H 0.9699 0.3253 -0.0901 0.097 Uiso 1 1 calc R . .
C10 C 0.8890(7) 0.3371(5) -0.0120(5) 0.039(4) Uani 1 1 d . . .
H10 H 0.8565 0.3254 0.0014 0.047 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.9865(11) 0.3700(8) -0.0495(7) 0.108(11) Uani 1 1 d . . .
H11 H 1.0201 0.3813 -0.0620 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
C11S C 0.2284(16) 0.0655(11) 0.8012(10) 0.152(13) Uiso 1 1 d . . .
H11A H 0.2521 0.0836 0.7846 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.1878 0.0635 0.7905 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
H11C H 0.2462 0.0375 0.8022 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.9202(7) 0.3716(5) 0.0048(5) 0.039(4) Uani 1 1 d . . .
H12 H 0.9076 0.3832 0.0286 0.047 Uiso 1 1 calc R . .
C12S C 0.2474(16) 0.1266(12) 0.8519(11) 0.162(14) Uiso 1 1 d . . .
H12A H 0.2694 0.1378 0.8299 0.243 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.2735 0.1259 0.8750 0.243 Uiso 1 1 calc R . .
H12C H 0.2131 0.1446 0.8569 0.243 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.9682(9) 0.3878(6) -0.0137(6) 0.064(6) Uani 1 1 d . . .
C13S C 0.1946(16) 0.0606(12) 0.8698(11) 0.142(12) Uiso 1 1 d . . .
H13S H 0.1737 0.0360 0.8622 0.171 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 1.0046(10) 0.4255(8) 0.0034(7) 0.082(7) Uani 1 1 d . . .
C14A C 0.9870(11) 0.4421(7) 0.0435(6) 0.086(8) Uani 1 1 d . . .
H14A H 1.0123 0.4659 0.0506 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.9921 0.4199 0.0629 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
H14C H 0.9453 0.4510 0.0425 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.5674(7) 0.2770(5) -0.0465(4) 0.034(4) Uani 1 1 d . . .
C16 C 0.5090(7) 0.2783(6) -0.0634(5) 0.049(5) Uani 1 1 d . . .
H16 H 0.5011 0.2643 -0.0873 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.5781(7) 0.2972(5) -0.0105(4) 0.039(4) Uani 1 1 d . . .
H17 H 0.6165 0.2958 0.0013 0.047 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.4629(9) 0.3002(7) -0.0451(6) 0.074(7) Uani 1 1 d . . .
H18 H 0.4247 0.3022 -0.0571 0.088 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.5326(8) 0.3195(6) 0.0081(5) 0.053(5) Uani 1 1 d . . .
H19 H 0.5410 0.3344 0.0314 0.064 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.4747(8) 0.3194(7) -0.0083(6) 0.063(6) Uani 1 1 d . . .
C21 C 0.4230(12) 0.3424(10) 0.0120(7) 0.104(10) Uani 1 1 d . . .
C21A C 0.4360(10) 0.3643(8) 0.0508(6) 0.089(8) Uani 1 1 d . . .
H21D H 0.3995 0.3775 0.0600 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
H21E H 0.4665 0.3858 0.0472 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
H21F H 0.4501 0.3437 0.0700 0.133 Uiso 1 1 calc R . .
C21S C 0.869(3) 0.518(3) 0.161(2) 0.39(5) Uiso 1 1 d . . .
H21A H 0.8897 0.4906 0.1589 0.590 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.8267 0.5137 0.1561 0.590 Uiso 1 1 calc R . .
H21C H 0.8757 0.5289 0.1873 0.590 Uiso 1 1 calc R . .
C22S C 0.935(2) 0.5402(17) 0.0968(16) 0.26(3) Uiso 1 1 d . . .
H22C H 0.9526 0.5123 0.0989 0.397 Uiso 1 1 calc R . .
H22D H 0.9660 0.5614 0.0966 0.397 Uiso 1 1 calc R . .
H22E H 0.9111 0.5420 0.0726 0.397 Uiso 1 1 calc R . .
C23S C 0.847(5) 0.581(3) 0.140(3) 0.45(6) Uiso 1 1 d . . .
H23S H 0.8130 0.5839 0.1552 0.546 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.2602(14) 0.0766(7) 0.0115(6) 0.120(9) Uani 1 1 d DU . .
C22 C 0.2718(14) 0.1114(9) -0.0185(9) 0.142(13) Uani 1 1 d DU . .
H22A H 0.2419 0.1338 -0.0154 0.171 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.2667 0.0997 -0.0450 0.171 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.3373(14) 0.1315(12) -0.0142(11) 0.190(17) Uani 1 1 d DU . .
H23A H 0.3682 0.1094 -0.0144 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.3414 0.1476 0.0103 0.228 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.3436(17) 0.1625(15) -0.0519(13) 0.26(3) Uiso 1 1 d D . .
H24A H 0.3172 0.1871 -0.0499 0.312 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.3344 0.1475 -0.0765 0.312 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.4226(15) 0.1777(13) -0.0488(12) 0.209(19) Uiso 1 1 d D . .

H25A H 0.4329 0.1938 -0.0720 0.314 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.4474 0.1525 -0.0473 0.314 Uiso 1 1 calc R . .
H25C H 0.4296 0.1948 -0.0256 0.314 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.264(2) 0.0913(12) 0.0518(9) 0.184(16) Uani 1 1 d DU . .
H26A H 0.3065 0.0970 0.0586 0.221 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.2502 0.0689 0.0692 0.221 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.2256(19) 0.1334(12) 0.0592(10) 0.188(17) Uani 1 1 d DU . .
H27A H 0.2442 0.1572 0.0457 0.226 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.1850 0.1296 0.0481 0.226 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.222(3) 0.144(2) 0.1042(15) 0.32(3) Uiso 1 1 d D . .
H28A H 0.2621 0.1456 0.1157 0.384 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.2002 0.1208 0.1175 0.384 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.187(3) 0.1874(19) 0.1106(17) 0.34(4) Uiso 1 1 d D . .
H29A H 0.1935 0.1971 0.1373 0.512 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.1440 0.1832 0.1059 0.512 Uiso 1 1 calc R . .
H29C H 0.2016 0.2084 0.0924 0.512 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.1944(14) 0.0607(9) 0.0014(7) 0.107(9) Uani 1 1 d DU . .
H30A H 0.1692 0.0860 -0.0011 0.128 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.1956 0.0479 -0.0248 0.128 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.1605(18) 0.0293(9) 0.0280(9) 0.154(14) Uani 1 1 d DU . .
H31A H 0.1831 0.0027 0.0295 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.1588 0.0410 0.0546 0.184 Uiso 1 1 calc R . .
C31S C 0.5312(18) 0.3557(12) 0.8566(12) 0.082(12) Uiso 0.594(15) 1 d
P . .
H31C H 0.5342 0.3381 0.8798 0.122 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
H31D H 0.5635 0.3487 0.8390 0.122 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
H31E H 0.4929 0.3507 0.8433 0.122 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
C32 C 0.0994(18) 0.0203(13) 0.0139(11) 0.163(15) Uiso 1 1 d D . .
H32A H 0.0833 -0.0005 0.0322 0.196 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.0766 0.0464 0.0180 0.196 Uiso 1 1 calc R . .
C32S C 0.5248(17) 0.4122(12) 0.9099(11) 0.083(12) Uiso 0.594(15) 1 d
P . .
H32C H 0.5282 0.3874 0.9265 0.124 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
H32D H 0.4849 0.4241 0.9120 0.124 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
H32E H 0.5544 0.4330 0.9182 0.124 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
C33 C 0.0826(17) 0.0061(13) -0.0237(11) 0.184(16) Uiso 1 1 d D . .
H33A H 0.0392 0.0041 -0.0257 0.276 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.1001 -0.0215 -0.0282 0.276 Uiso 1 1 calc R . .
H33C H 0.0970 0.0258 -0.0432 0.276 Uiso 1 1 calc R . .
C33S C 0.5338(16) 0.4303(12) 0.8403(11) 0.073(11) Uiso 0.594(15) 1 d
P . .
H33S H 0.5379 0.4585 0.8485 0.087 Uiso 0.594(15) 1 calc PR . .
C34 C 0.3044(14) 0.0384(10) 0.0060(8) 0.127(11) Uani 1 1 d DU . .
H34A H 0.3443 0.0475 0.0153 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.2916 0.0157 0.0235 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
C34S C 0.487(2) 0.3776(15) 0.7701(14) 0.058(13) Uiso 0.406(15) 1 d P
. .
H34S H 0.4781 0.3737 0.7433 0.070 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
C35 C 0.3112(14) 0.0203(9) -0.0324(8) 0.108(9) Uani 1 1 d U . .
H35A H 0.3285 0.0414 -0.0499 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.2716 0.0123 -0.0431 0.129 Uiso 1 1 calc R . .
C35S C 0.471(3) 0.302(2) 0.780(2) 0.11(2) Uiso 0.406(15) 1 d P . .
H35C H 0.4725 0.2815 0.8019 0.172 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
H35D H 0.4980 0.2924 0.7600 0.172 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
H35E H 0.4303 0.3030 0.7697 0.172 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
C36 C 0.3510(13) -0.0178(10) -0.0305(8) 0.113(9) Uiso 1 1 d . . .
H36A H 0.3322 -0.0388 -0.0136 0.136 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.3891 -0.0095 -0.0178 0.136 Uiso 1 1 calc R . .
C36S C 0.499(3) 0.346(2) 0.832(2) 0.10(2) Uiso 0.406(15) 1 d P . .
H36C H 0.4969 0.3195 0.8456 0.149 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
H36D H 0.4701 0.3658 0.8428 0.149 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
H36E H 0.5394 0.3581 0.8359 0.149 Uiso 0.406(15) 1 calc PR . .
C37 C 0.3654(15) -0.0393(10) -0.0699(9) 0.146(12) Uiso 1 1 d . . .
H37A H 0.3910 -0.0636 -0.0651 0.218 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.3858 -0.0194 -0.0867 0.218 Uiso 1 1 calc R . .
H37C H 0.3283 -0.0484 -0.0827 0.218 Uiso 1 1 calc R . .

C38 C 0.1282(11) 0.2604(11) 0.8452(10) 0.191(18) Uani 1 1 d DU . .
H38A H 0.0982 0.2386 0.8507 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.1608 0.2463 0.8314 0.229 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.152(4) 0.274(2) 0.8812(16) 0.42(5) Uani 1 1 d DU . .
H39A H 0.1226 0.2921 0.8938 0.499 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.1883 0.2900 0.8768 0.499 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.168(4) 0.234(3) 0.9110(16) 0.47(5) Uiso 1 1 d DU . .
H40A H 0.1564 0.2068 0.8997 0.562 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.2106 0.2337 0.9185 0.562 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.126(4) 0.247(3) 0.948(2) 0.55(6) Uiso 1 1 d DU . .
H41A H 0.1340 0.2279 0.9695 0.824 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.0841 0.2450 0.9398 0.824 Uiso 1 1 calc R . .
H41C H 0.1350 0.2757 0.9558 0.824 Uiso 1 1 calc R . .
C41S C 0.5133(11) 0.5681(8) 0.8595(7) 0.091(7) Uiso 1 1 d . . .
C43S C 0.5431(10) 0.5424(7) 0.7948(6) 0.069(6) Uiso 1 1 d . . .
N2 N 0.0977(9) 0.2923(7) 0.8148(5) 0.099(7) Uani 1 1 d DU . .
C42 C 0.1458(15) 0.3222(12) 0.8022(16) 0.26(3) Uani 1 1 d DU . .
H42A H 0.1503 0.3434 0.8229 0.317 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.1301 0.3370 0.7789 0.317 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.2119(13) 0.3064(10) 0.7920(13) 0.24(2) Uani 1 1 d DU . .
H43A H 0.2119 0.2909 0.7671 0.284 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.2283 0.2881 0.8128 0.284 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.2500(15) 0.3501(11) 0.7889(17) 0.26(3) Uiso 1 1 d D . .
H44A H 0.2488 0.3661 0.8135 0.309 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.2346 0.3679 0.7674 0.309 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 0.3242(14) 0.3318(15) 0.7793(14) 0.24(2) Uiso 1 1 d D . .
H45A H 0.3511 0.3558 0.7774 0.361 Uiso 1 1 calc R . .
H45B H 0.3240 0.3162 0.7549 0.361 Uiso 1 1 calc R . .
H45C H 0.3378 0.3136 0.8006 0.361 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 0.0678(13) 0.2770(7) 0.7771(7) 0.56(8) Uiso 1 1 d D . .
H46A H 0.0978 0.2674 0.7584 0.674 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 0.0437 0.2995 0.7649 0.674 Uiso 1 1 calc R . .
C47 C 0.0259 0.2383 0.7906 0.433 Uiso 1 1 d D . .
H47A H -0.0134 0.2395 0.7773 0.519 Uiso 1 1 calc R . .
H47B H 0.0202 0.2387 0.8191 0.519 Uiso 1 1 calc R . .
C48 C 0.0638(9) 0.1960(5) 0.7772(8) 0.449 Uiso 1 1 d D . .
H48A H 0.0791 0.1799 0.7999 0.539 Uiso 1 1 calc R . .
H48B H 0.0970 0.2030 0.7599 0.539 Uiso 1 1 calc R . .
C49 C 0.0000 0.1672(6) 0.7500 0.44(7) Uiso 1 2 d SD . .
H49A H 0.0097 0.1374 0.7479 0.656 Uiso 0.50 1 calc PR . .
H49B H -0.0051 0.1791 0.7239 0.656 Uiso 0.50 1 calc PR . .
H49C H -0.0369 0.1706 0.7643 0.656 Uiso 0.50 1 calc PR . .
C51 C 0.001(2) 0.3544(15) 0.8098(13) 0.28(3) Uani 1 1 d DU . .
H51A H -0.0215 0.3395 0.7889 0.334 Uiso 1 1 calc R . .
H51B H 0.0282 0.3738 0.7969 0.334 Uiso 1 1 calc R . .
C51S C 0.6836(9) 0.4883(7) 0.6529(5) 0.069(6) Uiso 1 1 d . . .
H51C H 0.7269 0.4905 0.6507 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
H51D H 0.6651 0.5147 0.6445 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
H51E H 0.6689 0.4654 0.6364 0.104 Uiso 1 1 calc R . .
C52 C -0.046(3) 0.3825(19) 0.8314(16) 0.34(4) Uani 1 1 d DU . .
H52A H -0.0239 0.4014 0.8491 0.410 Uiso 1 1 calc R . .
H52B H -0.0702 0.3637 0.8479 0.410 Uiso 1 1 calc R . .
C52S C 0.7166(10) 0.4783(7) 0.7231(5) 0.083(7) Uiso 1 1 d . . .
H52C H 0.7546 0.4818 0.7101 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
H52D H 0.7162 0.4512 0.7365 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
H52E H 0.7116 0.5008 0.7421 0.124 Uiso 1 1 calc R . .
C53 C -0.093(2) 0.4113(17) 0.8057(17) 0.30(3) Uiso 1 1 d D . .
H53A H -0.1215 0.4244 0.8230 0.445 Uiso 1 1 calc R . .
H53B H -0.1141 0.3936 0.7868 0.445 Uiso 1 1 calc R . .
H53C H -0.0708 0.4330 0.7920 0.445 Uiso 1 1 calc R . .
C54 C 0.9710(10) 0.4004(7) 0.2066(3) 0.139(12) Uani 1 1 d DU . .
H54A H 0.9647 0.3816 0.1840 0.166 Uiso 1 1 calc R . .
H54B H 0.9343 0.4165 0.2117 0.166 Uiso 1 1 calc R . .
C55 C 1.0337(14) 0.4325(8) 0.2021(6) 0.148(13) Uani 1 1 d DU . .
H55A H 1.0337 0.4546 0.2223 0.177 Uiso 1 1 calc R . .
H55B H 1.0704 0.4157 0.2055 0.177 Uiso 1 1 calc R . .

C56 C 1.032(2) 0.4524(15) 0.1616(13) 0.211(19) Uiso 1 1 d D . .
H56A H 1.0024 0.4754 0.1595 0.253 Uiso 1 1 calc R . .
H56B H 1.0245 0.4316 0.1407 0.253 Uiso 1 1 calc R . .
C57 C 1.101(2) 0.469(3) 0.1630(17) 0.53(7) Uiso 1 1 d D . .
H57A H 1.1092 0.4842 0.1388 0.792 Uiso 1 1 calc R . .
H57B H 1.1279 0.4456 0.1661 0.792 Uiso 1 1 calc R . .
H57C H 1.1062 0.4885 0.1851 0.792 Uiso 1 1 calc R . .
C58 C 0.9285(4) 0.3457(7) 0.2510(6) 0.113(10) Uani 1 1 d DU . .
H58A H 0.8949 0.3650 0.2558 0.136 Uiso 1 1 calc R . .
H58B H 0.9205 0.3291 0.2273 0.136 Uiso 1 1 calc R . .
C59 C 0.9455(10) 0.3153(8) 0.2905(7) 0.127(11) Uani 1 1 d DU . .
H59A H 0.9752 0.2937 0.2837 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
H59B H 0.9619 0.3326 0.3120 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
C60 C 0.8881(13) 0.2951(13) 0.3021(11) 0.185(17) Uiso 1 1 d D . .
H60A H 0.8774 0.2737 0.2823 0.222 Uiso 1 1 calc R . .
H60B H 0.8565 0.3167 0.3012 0.222 Uiso 1 1 calc R . .
C61 C 0.8875(18) 0.2743(13) 0.3419(11) 0.201(18) Uiso 1 1 d D . .
H61A H 0.8495 0.2598 0.3452 0.301 Uiso 1 1 calc R . .
H61B H 0.8924 0.2956 0.3622 0.301 Uiso 1 1 calc R . .
H61C H 0.9201 0.2540 0.3440 0.301 Uiso 1 1 calc R . .
N1S N 0.2268(10) 0.0840(8) 0.8428(7) 0.109(7) Uiso 1 1 d . . .
N2S N 0.8940(16) 0.5478(11) 0.1317(10) 0.166(12) Uiso 1 1 d . . .
N3 N 1.0000 0.3728(6) 0.2500 0.059(6) Uani 1 2 d SDU . .
N3S N 0.5357(15) 0.4000(11) 0.8678(10) 0.087(10) Uiso 0.594(15) 1 d P
. .
N3SA N 0.4882(19) 0.3408(14) 0.7938(13) 0.072(13) Uiso 0.406(15) 1 d
P . .
N5S N 0.6681(7) 0.4797(5) 0.6944(5) 0.065(5) Uiso 1 1 d . . .
O1 O 0.6759(5) 0.0414(4) -0.0702(3) 0.046(3) Uani 1 1 d . . .
O1S O 0.1943(9) 0.0735(6) 0.9045(6) 0.123(6) Uiso 1 1 d . . .
O2 O 0.7956(5) 0.0638(3) -0.0784(3) 0.034(3) Uani 1 1 d . . .
O2S O 0.8818(14) 0.6084(10) 0.1125(9) 0.193(11) Uiso 1 1 d . . .
O3 O 0.9194(5) 0.0736(3) -0.0688(3) 0.041(3) Uani 1 1 d . . .
O3S O 0.5266(13) 0.4228(8) 0.8019(9) 0.085(8) Uiso 0.594(15) 1 d P .
.
O4 O 0.8990(4) 0.1575(3) -0.0916(3) 0.036(3) Uani 1 1 d . . .
O3SA O 0.4972(14) 0.4129(10) 0.7802(9) 0.049(8) Uiso 0.406(15) 1 d P
. .
O4S O 0.5152(6) 0.5111(5) 0.7954(4) 0.076(4) Uiso 1 1 d . . .
O5 O 0.9940(5) 0.2021(3) -0.1266(3) 0.041(3) Uani 1 1 d . . .
O5S O 0.5932(7) 0.4686(5) 0.7373(5) 0.091(5) Uiso 1 1 d . . .
O6 O 0.9032(5) 0.2524(3) -0.1602(3) 0.037(3) Uani 1 1 d . . .
O7 O 0.8343(5) 0.3194(4) -0.1891(3) 0.045(3) Uani 1 1 d . . .
O8 O 0.7368(5) 0.2769(3) -0.1569(3) 0.035(3) Uani 1 1 d . . .
O9 O 0.6224(5) 0.2910(4) -0.1902(3) 0.046(3) Uani 1 1 d . . .
O10 O 0.5934(4) 0.2118(3) -0.1600(3) 0.035(3) Uani 1 1 d . . .
O11 O 0.5373(5) 0.1436(4) -0.1240(3) 0.045(3) Uani 1 1 d . . .
O12 O 0.6503(4) 0.1253(3) -0.0914(3) 0.029(2) Uani 1 1 d . . .
O13 O 0.7743(4) 0.1416(3) -0.0960(2) 0.024(2) Uani 1 1 d . . .
O14 O 0.8157(4) 0.2143(3) -0.1268(2) 0.026(2) Uani 1 1 d . . .
O15 O 0.6967(4) 0.1990(3) -0.1267(3) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
O16 O 0.7679(4) 0.1556(3) -0.1715(2) 0.032(2) Uani 1 1 d . . .
O17 O 0.7147(4) 0.0781(3) -0.1394(3) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
O18 O 0.8592(4) 0.0959(3) -0.1386(3) 0.032(2) Uani 1 1 d . . .
O19 O 0.8990(4) 0.1655(3) -0.1694(3) 0.032(2) Uani 1 1 d . . .
O20 O 0.8054(4) 0.2354(3) -0.2074(3) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
O21 O 0.6918(4) 0.2205(3) -0.2078(3) 0.035(3) Uani 1 1 d . . .
O22 O 0.6397(4) 0.1335(3) -0.1691(3) 0.034(3) Uani 1 1 d . . .
O23 O 0.7851(5) 0.0827(3) -0.2036(3) 0.035(3) Uani 1 1 d . . .
O24 O 0.9086(5) 0.0906(4) -0.2146(3) 0.044(3) Uani 1 1 d . . .
O25 O 0.8282(5) 0.1557(3) -0.2351(3) 0.036(3) Uani 1 1 d . . .
O26 O 0.7541(5) 0.2081(4) -0.2791(3) 0.045(3) Uani 1 1 d . . .
O27 O 0.7082(5) 0.1409(3) -0.2352(2) 0.035(3) Uani 1 1 d . . .
O28 O 0.6642(5) 0.0616(3) -0.2154(3) 0.041(3) Uani 1 1 d . . .
O29 O 0.7257(4) 0.1089(3) -0.0295(2) 0.028(2) Uani 1 1 d . . .
O30 O 0.8377(4) 0.1241(3) -0.0291(3) 0.030(2) Uani 1 1 d . . .

```
O31 O 0.7652(4) 0.1832(3) -0.0098(3) 0.029(2) Uani 1 1 d . . .
O32 O 0.9087(4) 0.2435(3) -0.0818(3) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
O33 O 0.8367(4) 0.2972(3) -0.1102(3) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
O34 O 0.8136(4) 0.2630(3) -0.0436(3) 0.025(2) Uani 1 1 d . . .
O35 O 0.6364(4) 0.2726(3) -0.1108(3) 0.030(2) Uani 1 1 d . . .
O36 O 0.5995(4) 0.2045(3) -0.0802(3) 0.030(2) Uani 1 1 d . . .
O37 O 0.6821(4) 0.2479(3) -0.0446(3) 0.027(2) Uani 1 1 d . . .
O38 O 0.8079(12) 0.0338(6) 0.1649(5) 0.142(8) Uani 1 1 d U . .
O40 O 1.0429(8) 0.4422(6) -0.0150(6) 0.148(10) Uani 1 1 d . . .
O42 O 0.3743(9) 0.3408(10) -0.0020(6) 0.218(17) Uani 1 1 d . . .
Si1 Si 0.76341(16) 0.17906(11) -0.12760(10) 0.0173(8) Uani 1 1 d . .
.
P1 P 0.77675(18) 0.13745(13) -0.00970(10) 0.0274(9) Uani 1 1 d . . .
P2 P 0.86140(17) 0.27796(13) -0.07035(10) 0.0286(9) Uani 1 1 d . . .
P3 P 0.62757(17) 0.24913(13) -0.07039(10) 0.0277(9) Uani 1 1 d . . .
Co1 Co 0.7500 0.2500 0.0000 0.0266(8) Uani 1 2 d S . .
Co2 Co 0.5129(3) 0.46649(16) 0.75677(17) 0.0456(16) Uiso 0.50 1 d P .
.
W1 W 0.71462(3) 0.08557(2) -0.084009(19) 0.03045(19) Uani 1 1 d . . .
W2 W 0.85925(3) 0.10499(2) -0.083043(19) 0.0311(2) Uani 1 1 d . . .
W3 W 0.91626(3) 0.20359(2) -0.127083(19) 0.03081(19) Uani 1 1 d . . .
W4 W 0.82166(3) 0.27347(2) -0.163824(19) 0.0320(2) Uani 1 1 d . . .
W5 W 0.65870(3) 0.25145(2) -0.164827(19) 0.0323(2) Uani 1 1 d . . .
W6 W 0.60850(3) 0.16418(2) -0.124914(19) 0.0309(2) Uani 1 1 d . . .
W7 W 0.85342(3) 0.11876(2) -0.191602(19) 0.0327(2) Uani 1 1 d . . .
W8 W 0.75884(3) 0.19124(2) -0.231284(18) 0.0339(2) Uani 1 1 d . . .
W9 W 0.70375(3) 0.10145(2) -0.192399(19) 0.0328(2) Uani 1 1 d . . .
N4S N 0.5454(8) 0.5724(6) 0.8231(5) 0.077(5) Uiso 1 1 d . . .
C53S C 0.6084(10) 0.4758(7) 0.7009(7) 0.077(6) Uiso 1 1 d . . .
C50 C 0.0405(17) 0.3204(8) 0.8317(12) 0.204(19) Uiso 1 1 d D . .
H50A H 0.0120 0.2994 0.8414 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
H50B H 0.0567 0.3348 0.8551 0.245 Uiso 1 1 calc R . .
C42S C 0.5718(19) 0.6066(10) 0.8246(12) 0.178(16) Uiso 1 1 d . . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
C1 0.035(10) 0.040(10) 0.020(8) 0.008(8) -0.002(7) 0.008(7)
C2 0.089(15) 0.047(12) 0.027(10) -0.006(9) 0.009(9) -0.003(10)
C3 0.071(13) 0.035(10) 0.027(9) 0.002(8) 0.005(9) 0.003(9)
C4 0.13(2) 0.044(12) 0.035(11) 0.024(10) 0.002(12) 0.009(12)
C5 0.105(17) 0.046(12) 0.019(9) 0.001(9) 0.003(10) 0.013(11)
C6 0.14(2) 0.046(12) 0.015(9) 0.006(9) 0.002(10) 0.004(12)
C7 0.23(4) 0.062(17) 0.054(15) 0.012(14) -0.011(18) 0.01(2)
C8 0.035(10) 0.035(9) 0.034(9) -0.003(8) 0.003(8) -0.003(7)
C8A 0.31(5) 0.078(18) 0.024(12) -0.007(12) -0.013(18) -0.03(2)
C9 0.087(16) 0.084(16) 0.073(14) -0.051(13) 0.060(13) -0.049(13)
C10 0.037(10) 0.046(11) 0.035(9) 0.000(9) 0.007(8) -0.002(8)
C11 0.11(2) 0.12(2) 0.103(19) -0.081(17) 0.087(16) -0.068(16)
C12 0.035(10) 0.048(11) 0.034(9) -0.018(8) 0.010(8) -0.012(8)
C13 0.056(13) 0.067(14) 0.068(13) -0.020(11) 0.027(11) -0.032(11)
C14 0.065(15) 0.090(18) 0.093(17) -0.053(15) 0.020(13) -0.030(13)
C14A 0.098(18) 0.099(18) 0.062(14) -0.037(13) 0.024(13) -0.045(15)
C15 0.029(10) 0.046(10) 0.028(9) -0.001(8) -0.009(7) 0.002(8)
C16 0.035(11) 0.071(13) 0.041(10) -0.015(10) -0.006(9) 0.010(9)
C17 0.022(9) 0.069(12) 0.027(9) -0.002(9) -0.008(7) 0.005(8)
C18 0.034(12) 0.116(19) 0.070(14) -0.038(14) -0.018(10) 0.017(12)
C19 0.041(12) 0.087(15) 0.031(9) -0.023(10) -0.006(9) 0.028(10)
C20 0.034(12) 0.102(17) 0.052(12) -0.025(12) -0.001(10) 0.030(11)
C21 0.064(17) 0.16(3) 0.084(17) -0.064(18) -0.020(14) 0.048(17)
C21A 0.078(16) 0.13(2) 0.059(14) -0.036(14) -0.010(12) 0.053(15)
```

N1 0.22(3) 0.075(15) 0.064(13) 0.005(12) -0.020(16) 0.013(17)
C22 0.18(3) 0.09(2) 0.16(3) 0.06(2) -0.04(2) -0.056(19)
C23 0.23(4) 0.15(3) 0.19(3) 0.06(3) -0.07(3) -0.02(3)
C26 0.28(4) 0.17(3) 0.09(2) 0.01(2) -0.06(2) 0.07(3)
C27 0.27(4) 0.18(3) 0.12(2) -0.06(2) -0.09(2) 0.12(3)
C30 0.14(2) 0.11(2) 0.066(16) -0.015(16) 0.004(16) 0.021(19)
C31 0.27(4) 0.08(2) 0.10(2) 0.033(18) -0.01(3) 0.03(2)
C34 0.15(3) 0.15(3) 0.079(18) 0.024(19) -0.052(18) -0.03(2)
C35 0.14(2) 0.10(2) 0.078(17) 0.023(16) 0.007(16) -0.001(18)
C38 0.17(3) 0.17(3) 0.24(4) 0.03(3) 0.01(3) 0.02(3)
C39 0.43(7) 0.46(7) 0.35(6) -0.04(5) -0.02(5) 0.00(5)
N2 0.103(16) 0.120(17) 0.076(13) -0.004(13) 0.020(12) -0.020(14)
C42 0.24(4) 0.27(4) 0.29(4) 0.06(4) 0.16(4) -0.05(3)
C43 0.29(4) 0.21(4) 0.21(4) -0.01(3) -0.07(3) 0.14(3)
C51 0.29(4) 0.27(4) 0.28(4) 0.07(3) -0.08(3) -0.04(3)
C52 0.34(6) 0.40(6) 0.29(5) -0.07(4) -0.02(4) -0.07(5)
C54 0.20(3) 0.13(2) 0.090(19) 0.019(17) 0.08(2) -0.03(2)
C55 0.19(3) 0.18(3) 0.074(18) 0.002(19) -0.057(19) -0.02(2)
C58 0.16(2) 0.10(2) 0.083(17) 0.017(15) 0.042(17) 0.000(18)
C59 0.15(3) 0.15(3) 0.081(17) 0.039(18) -0.029(17) -0.02(2)
N3 0.076(16) 0.086(17) 0.014(9) 0.000 -0.010(10) 0.000
O1 0.055(8) 0.052(7) 0.031(6) -0.008(6) 0.001(5) -0.005(6)
O2 0.046(7) 0.037(6) 0.018(5) -0.004(5) 0.007(5) 0.010(5)
O3 0.048(7) 0.042(7) 0.034(6) -0.005(5) 0.012(5) 0.011(5)
O4 0.040(6) 0.054(7) 0.013(5) -0.003(5) 0.004(5) 0.004(5)
O5 0.037(6) 0.054(7) 0.032(6) -0.007(5) 0.011(5) -0.006(5)
O6 0.041(6) 0.051(7) 0.020(5) -0.008(5) 0.021(5) 0.002(5)
O7 0.054(7) 0.059(8) 0.023(6) -0.001(5) 0.006(5) -0.006(6)
O8 0.059(7) 0.032(6) 0.013(5) 0.003(5) 0.011(5) 0.002(5)
O9 0.059(8) 0.050(7) 0.029(6) 0.008(6) 0.001(5) 0.013(6)
O10 0.037(6) 0.051(7) 0.016(5) 0.002(5) -0.007(5) 0.017(5)
O11 0.047(7) 0.061(8) 0.026(6) -0.003(6) 0.009(5) -0.005(6)
O12 0.033(6) 0.039(6) 0.017(5) 0.000(5) 0.009(4) -0.005(5)
O13 0.030(6) 0.028(6) 0.014(5) -0.001(4) 0.006(4) 0.004(4)
O14 0.032(6) 0.037(6) 0.010(5) -0.001(4) 0.010(4) 0.006(5)
O15 0.021(5) 0.058(7) 0.015(5) 0.003(5) 0.006(4) 0.003(5)
O16 0.046(7) 0.039(6) 0.010(5) -0.004(5) 0.006(4) 0.008(5)
O17 0.043(6) 0.033(6) 0.019(5) -0.005(5) 0.005(5) 0.000(5)
O18 0.035(6) 0.038(6) 0.023(5) -0.003(5) 0.000(5) 0.005(5)
O19 0.036(6) 0.039(6) 0.021(5) 0.000(5) 0.008(5) 0.007(5)
O20 0.040(6) 0.036(6) 0.018(5) 0.000(5) 0.013(5) 0.007(5)
O21 0.040(6) 0.046(7) 0.018(5) 0.002(5) -0.002(5) 0.004(5)
O22 0.030(6) 0.053(7) 0.018(5) -0.004(5) -0.003(4) -0.006(5)
O23 0.051(7) 0.035(6) 0.021(5) -0.006(5) 0.005(5) 0.005(5)
O24 0.046(7) 0.054(7) 0.033(6) -0.007(6) 0.005(5) 0.010(6)
O25 0.054(7) 0.043(7) 0.013(5) -0.001(5) 0.008(5) -0.007(5)
O26 0.066(8) 0.057(8) 0.013(5) 0.000(5) 0.002(5) 0.002(6)
O27 0.045(7) 0.049(7) 0.009(5) -0.006(5) -0.004(5) 0.010(5)
O28 0.046(7) 0.054(7) 0.022(5) -0.015(5) 0.002(5) -0.002(6)
O29 0.036(6) 0.034(6) 0.014(5) 0.000(4) 0.006(4) 0.002(5)
O30 0.027(6) 0.041(6) 0.021(5) 0.006(5) 0.002(4) 0.004(5)
O31 0.028(6) 0.044(7) 0.017(5) 0.012(5) 0.002(4) 0.000(5)
O32 0.034(6) 0.043(6) 0.015(5) -0.010(5) 0.005(4) -0.012(5)
O33 0.036(6) 0.041(6) 0.018(5) -0.004(5) 0.008(5) -0.005(5)
O34 0.025(5) 0.028(6) 0.024(5) 0.006(5) 0.001(4) -0.003(4)
O35 0.032(6) 0.039(6) 0.020(5) 0.002(5) -0.002(4) 0.007(5)
O36 0.033(6) 0.041(6) 0.015(5) -0.008(5) 0.003(4) 0.002(5)
O37 0.024(6) 0.035(6) 0.021(5) 0.002(5) 0.002(4) 0.005(4)
O38 0.29(3) 0.082(13) 0.051(10) 0.016(10) -0.010(13) 0.001(15)
O40 0.127(15) 0.152(17) 0.168(18) -0.098(15) 0.112(15) -0.118(14)
O42 0.083(14) 0.42(4) 0.149(19) -0.19(2) -0.063(14) 0.13(2)
Si1 0.023(2) 0.018(2) 0.0107(18) 0.0001(16) 0.0047(16) 0.0007(16)
P1 0.035(2) 0.033(2) 0.0146(19) 0.0016(18) 0.0034(17) 0.0000(18)
P2 0.032(2) 0.039(2) 0.0161(19) -0.0017(18) 0.0076(17) -0.0030(18)
P3 0.028(2) 0.040(2) 0.0160(18) -0.0032(18) 0.0023(17) 0.0023(18)
Co1 0.0279(19) 0.038(2) 0.0142(16) -0.0002(15) 0.0031(14) -0.0004(16)

```
W1 0.0391(4) 0.0337(4) 0.0187(4) -0.0010(3) 0.0047(3) -0.0035(3)
W2 0.0344(4) 0.0402(4) 0.0188(4) 0.0015(3) 0.0054(3) 0.0085(3)
W3 0.0282(4) 0.0447(5) 0.0198(4) -0.0036(3) 0.0080(3) -0.0007(3)
W4 0.0415(5) 0.0389(5) 0.0158(3) 0.0032(3) 0.0066(3) -0.0032(3)
W5 0.0384(4) 0.0432(5) 0.0152(3) 0.0026(3) 0.0008(3) 0.0086(3)
W6 0.0281(4) 0.0448(5) 0.0197(4) -0.0063(3) 0.0011(3) -0.0016(3)
W7 0.0379(5) 0.0428(5) 0.0178(4) -0.0055(3) 0.0081(3) 0.0046(3)
W8 0.0445(5) 0.0460(5) 0.0113(3) -0.0014(3) 0.0039(3) 0.0027(4)
W9 0.0392(5) 0.0418(5) 0.0174(4) -0.0072(3) 0.0024(3) -0.0006(3)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C3 1.36(2) . ?
C1 C2 1.41(2) . ?
C1 P1 1.790(14) . ?
C2 C4 1.38(2) . ?
C2 H2 0.9300 . ?
C3 C5 1.39(2) . ?
C3 H3 0.9300 . ?
C4 C6 1.35(2) . ?
C4 H4 0.9300 . ?
C5 C6 1.38(2) . ?
C5 H5 0.9300 . ?
C6 C7 1.49(3) . ?
C7 O38 1.23(3) . ?
C7 C8A 1.46(3) . ?
C8 C10 1.38(2) . ?
C8 C9 1.41(2) . ?
C8 P2 1.787(15) . ?
C8A H8A1 0.9600 . ?
C8A H8A2 0.9600 . ?
C8A H8A3 0.9600 . ?
C9 C11 1.35(3) . ?
C9 H9 0.9300 . ?
C10 C12 1.39(2) . ?
C10 H10 0.9300 . ?
C11 C13 1.40(3) . ?
C11 H11 0.9300 . ?
C11S N1S 1.52(3) . ?
C11S H11A 0.9600 . ?
C11S H11B 0.9600 . ?
C11S H11C 0.9600 . ?
C12 C13 1.34(2) . ?
C12 H12 0.9300 . ?
C12S N1S 1.44(4) . ?
C12S H12A 0.9600 . ?
```

```
C12S H12B 0.9600 . ?
C12S H12C 0.9600 . ?
C13 C14 1.53(3) . ?
C13S O1S 1.24(3) . ?
C13S N1S 1.38(4) . ?
C13S H13S 0.9300 . ?
C14 O40 1.18(2) . ?
C14 C14A 1.50(3) . ?
C14A H14A 0.9600 . ?
C14A H14B 0.9600 . ?
C14A H14C 0.9600 . ?
C15 C17 1.38(2) . ?
C15 C16 1.40(2) . ?
C15 P3 1.793(16) . ?
C16 C18 1.38(2) . ?
C16 H16 0.9300 . ?
C17 C19 1.38(2) . ?
C17 H17 0.9300 . ?
C18 C20 1.40(2) . ?
C18 H18 0.9300 . ?
C19 C20 1.38(2) . ?
C19 H19 0.9300 . ?
C20 C21 1.52(3) . ?
C21 O42 1.17(3) . ?
C21 C21A 1.50(3) . ?
C21A H21D 0.9600 . ?
C21A H21E 0.9600 . ?
C21A H21F 0.9600 . ?
C21S N2S 1.48(8) . ?
C21S H21A 0.9600 . ?
C21S H21B 0.9600 . ?
C21S H21C 0.9600 . ?
C22S N2S 1.51(5) . ?
C22S H22C 0.9600 . ?
C22S H22D 0.9600 . ?
C22S H22E 0.9600 . ?
C23S O2S 1.47(10) . ?
C23S N2S 1.50(10) . ?
C23S H23S 0.9300 . ?
N1 C26 1.44(3) . ?
N1 C22 1.51(2) . ?
N1 C34 1.55(3) . ?
N1 C30 1.56(3) . ?
C22 C23 1.58(2) . ?
C22 H22A 0.9700 . ?
C22 H22B 0.9700 . ?
C23 C24 1.61(2) . ?
C23 H23A 0.9700 . ?
C23 H23B 0.9700 . ?
C24 C25 1.81(2) . ?
C24 H24A 0.9700 . ?
C24 H24B 0.9700 . ?
C25 H25A 0.9600 . ?
C25 H25B 0.9600 . ?
C25 H25C 0.9600 . ?
C26 C27 1.59(3) . ?
C26 H26A 0.9700 . ?
C26 H26B 0.9700 . ?
C27 C28 1.55(4) . ?
C27 H27A 0.9700 . ?
C27 H27B 0.9700 . ?
C28 C29 1.59(4) . ?
C28 H28A 0.9700 . ?
C28 H28B 0.9700 . ?
C29 H29A 0.9600 . ?
C29 H29B 0.9600 . ?
```

C29 H29C 0.9600 . ?
C30 C31 1.54(3) . ?
C30 H30A 0.9700 . ?
C30 H30B 0.9700 . ?
C31 C32 1.45(4) . ?
C31 H31A 0.9700 . ?
C31 H31B 0.9700 . ?
C31S N3S 1.44(5) . ?
C31S H31C 0.9600 . ?
C31S H31D 0.9600 . ?
C31S H31E 0.9600 . ?
C32 C33 1.39(3) . ?
C32 H32A 0.9700 . ?
C32 H32B 0.9700 . ?
C32S N3S 1.49(4) . ?
C32S H32C 0.9600 . ?
C32S H32D 0.9600 . ?
C32S H32E 0.9600 . ?
C33 H33A 0.9600 . ?
C33 H33B 0.9600 . ?
C33 H33C 0.9600 . ?
C33S O3S 1.32(4) . ?
C33S N3S 1.33(4) . ?
C33S H33S 0.9300 . ?
C34 C35 1.42(3) . ?
C34 H34A 0.9700 . ?
C34 H34B 0.9700 . ?
C34S O3SA 1.17(5) . ?
C34S N3SA 1.40(6) . ?
C34S H34S 0.9300 . ?
C35 C36 1.48(3) . ?
C35 H35A 0.9700 . ?
C35 H35B 0.9700 . ?
C35S N3SA 1.36(7) . ?
C35S H35C 0.9600 . ?
C35S H35D 0.9600 . ?
C35S H35E 0.9600 . ?
C36 C37 1.53(4) . ?
C36 H36A 0.9700 . ?
C36 H36B 0.9700 . ?
C36S N3SA 1.32(7) . ?
C36S H36C 0.9600 . ?
C36S H36D 0.9600 . ?
C36S H36E 0.9600 . ?
C37 H37A 0.9600 . ?
C37 H37B 0.9600 . ?
C37 H37C 0.9600 . ?
C38 C39 1.37(6) . ?
C38 N2 1.57(3) . ?
C38 H38A 0.9700 . ?
C38 H38B 0.9700 . ?
C39 C40 1.63(5) . ?
C39 H39A 0.9700 . ?
C39 H39B 0.9700 . ?
C40 C41 1.61(5) . ?
C40 H40A 0.9700 . ?
C40 H40B 0.9700 . ?
C41 H41A 0.9600 . ?
C41 H41B 0.9600 . ?
C41 H41C 0.9600 . ?
C41S N4S 1.43(3) . ?
C41S C42S 2.13(4) . ?
C43S O4S 1.16(2) . ?
C43S N4S 1.34(3) . ?
N2 C42 1.48(2) . ?
N2 C46 1.497(17) . ?

```
N2 C50 1.65(3) . ?
C42 C43 1.58(2) . ?
C42 H42A 0.9700 . ?
C42 H42B 0.9700 . ?
C43 C44 1.61(2) . ?
C43 H43A 0.9700 . ?
C43 H43B 0.9700 . ?
C44 C45 1.77(2) . ?
C44 H44A 0.9700 . ?
C44 H44B 0.9700 . ?
C45 H45A 0.9600 . ?
C45 H45B 0.9600 . ?
C45 H45C 0.9600 . ?
C46 C47 1.593(17) . ?
C46 H46A 0.9700 . ?
C46 H46B 0.9700 . ?
C47 C48 1.635(17) . ?
C47 H47A 0.9700 . ?
C47 H47B 0.9700 . ?
C48 C49 1.893(12) . ?
C48 H48A 0.9700 . ?
C48 H48B 0.9700 . ?
C49 H49A 0.9600 . ?
C49 H49B 0.9600 . ?
C49 H49C 0.9600 . ?
C51 C50 1.56(3) . ?
C51 C52 1.55(3) . ?
C51 H51A 0.9700 . ?
C51 H51B 0.9700 . ?
C51S N5S 1.47(2) . ?
C51S H51C 0.9600 . ?
C51S H51D 0.9600 . ?
C51S H51E 0.9600 . ?
C52 C53 1.61(4) . ?
C52 H52A 0.9700 . ?
C52 H52B 0.9700 . ?
C52S N5S 1.43(2) . ?
C52S H52C 0.9600 . ?
C52S H52D 0.9600 . ?
C52S H52E 0.9600 . ?
C53 H53A 0.9600 . ?
C53 H53B 0.9600 . ?
C53 H53C 0.9600 . ?
C54 C55 1.72(3) . ?
C54 N3 1.807(13) . ?
C54 H54A 0.9700 . ?
C54 H54B 0.9700 . ?
C55 C56 1.50(4) . ?
C55 H55A 0.9700 . ?
C55 H55B 0.9700 . ?
C56 C57 1.61(4) . ?
C56 H56A 0.9700 . ?
C56 H56B 0.9700 . ?
C57 H57A 0.9600 . ?
C57 H57B 0.9600 . ?
C57 H57C 0.9600 . ?
C58 C59 1.67(3) . ?
C58 N3 1.790(12) . ?
C58 H58A 0.9700 . ?
C58 H58B 0.9700 . ?
C59 C60 1.475(18) . ?
C59 H59A 0.9700 . ?
C59 H59B 0.9700 . ?
C60 C61 1.49(3) . ?
C60 H60A 0.9700 . ?
C60 H60B 0.9700 . ?
```

```
C61 H61A 0.9600 . ?
C61 H61B 0.9600 . ?
C61 H61C 0.9600 . ?
N3 C58 1.790(12) 2_755 ?
N3 C54 1.807(13) 2_755 ?
N5S C53S 1.34(3) . ?
O1 W1 1.695(11) . ?
O2 W2 1.914(10) . ?
O2 W1 1.917(10) . ?
O3 W2 1.711(10) . ?
O3S O3SA 1.02(3) . ?
O3S Co2 2.06(3) . ?
O4 W2 1.889(11) . ?
O4 W3 1.916(10) . ?
O3SA Co2 1.89(3) . ?
O3SA Co2 2.10(3) 2_656 ?
O4S Co2 1.910(15) . ?
O4S Co2 2.322(15) 2_656 ?
O5 W3 1.714(10) . ?
O5S C53S 1.30(2) . ?
O5S Co2 1.899(17) . ?
O5S Co2 2.350(17) 2_656 ?
O6 W3 1.911(10) . ?
O6 W4 1.915(10) . ?
O7 W4 1.697(11) . ?
O8 W4 1.892(10) . ?
O8 W5 1.911(10) . ?
O9 W5 1.698(10) . ?
O10 W5 1.910(11) . ?
O10 W6 1.928(9) . ?
O11 W6 1.697(11) . ?
O12 W6 1.888(10) . ?
O12 W1 1.900(10) . ?
O13 Si1 1.600(9) . ?
O13 W2 2.231(9) . ?
O13 W1 2.234(9) . ?
O14 Si1 1.596(10) . ?
O14 W4 2.237(9) . ?
O14 W3 2.242(9) . ?
O15 Si1 1.599(10) . ?
O15 W6 2.230(9) . ?
O15 W5 2.238(10) . ?
O16 Si1 1.656(9) . ?
O16 W8 2.308(9) . ?
O16 W9 2.311(10) . ?
O16 W7 2.321(9) . ?
O17 W1 1.883(9) . ?
O17 W9 1.940(9) . ?
O18 W2 1.896(9) . ?
O18 W7 1.926(9) . ?
O19 W3 1.891(9) . ?
O19 W7 1.920(10) . ?
O20 W8 1.892(10) . ?
O20 W4 1.920(9) . ?
O21 W5 1.900(9) . ?
O21 W8 1.921(10) . ?
O22 W6 1.911(9) . ?
O22 W9 1.913(10) . ?
O23 W7 1.918(10) . ?
O23 W9 1.931(10) . ?
O24 W7 1.702(10) . ?
O25 W8 1.897(11) . ?
O25 W7 1.942(10) . ?
O26 W8 1.698(9) . ?
O27 W9 1.904(10) . ?
O27 W8 1.934(11) . ?
```

```
O28 W9 1.700(10) . ?
O29 P1 1.576(10) . ?
O29 W1 1.987(9) . ?
O30 P1 1.563(10) . ?
O30 W2 1.979(9) . ?
O31 P1 1.455(10) . ?
O31 Co1 2.145(10) . ?
O32 P2 1.554(10) . ?
O32 W3 1.983(9) . ?
O33 P2 1.561(10) . ?
O33 W4 1.977(9) . ?
O34 P2 1.476(10) . ?
O34 Co1 2.089(9) . ?
O35 P3 1.562(10) . ?
O35 W5 2.009(9) . ?
O36 P3 1.562(10) . ?
O36 W6 1.979(9) . ?
O37 P3 1.471(10) . ?
O37 Co1 2.101(9) . ?
Co1 O34 2.089(9) 7_655 ?
Co1 O37 2.101(9) 7_655 ?
Co1 O31 2.145(10) 7_655 ?
Co2 Co2 0.722(10) 2_656 ?
Co2 O3SA 2.10(3) 2_656 ?
Co2 O4S 2.322(15) 2_656 ?
Co2 O5S 2.350(17) 2_656 ?
N4S C42S 1.22(4) . ?
C50 H50A 0.9700 . ?
C50 H50B 0.9700 . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C3 C1 C2 118.6(14) . . ?
C3 C1 P1 121.4(12) . . ?
C2 C1 P1 120.0(12) . . ?
C4 C2 C1 118.4(16) . . ?
C4 C2 H2 120.8 . . ?
C1 C2 H2 120.8 . . ?
C1 C3 C5 122.2(16) . . ?
C1 C3 H3 118.9 . . ?
C5 C3 H3 118.9 . . ?
C6 C4 C2 122.5(18) . . ?
C6 C4 H4 118.8 . . ?
C2 C4 H4 118.8 . . ?
C6 C5 C3 118.7(16) . . ?
C6 C5 H5 120.6 . . ?
C3 C5 H5 120.6 . . ?
C4 C6 C5 119.6(15) . . ?
C4 C6 C7 122.3(19) . . ?
C5 C6 C7 118.1(18) . . ?
O38 C7 C8A 121(2) . . ?
O38 C7 C6 117(2) . . ?
C8A C7 C6 122(2) . . ?
C10 C8 C9 117.6(15) . . ?
C10 C8 P2 120.8(12) . . ?
C9 C8 P2 121.6(12) . . ?
C7 C8A H8A1 109.5 . . ?
C7 C8A H8A2 109.5 . . ?
H8A1 C8A H8A2 109.5 . . ?
C7 C8A H8A3 109.5 . . ?
```

```
H8A1 C8A H8A3 109.5 . . ?
H8A2 C8A H8A3 109.5 . . ?
C11 C9 C8 119.7(17) . . ?
C11 C9 H9 120.2 . . ?
C8 C9 H9 120.2 . . ?
C8 C10 C12 121.8(15) . . ?
C8 C10 H10 119.1 . . ?
C12 C10 H10 119.1 . . ?
C9 C11 C13 121.7(18) . . ?
C9 C11 H11 119.1 . . ?
C13 C11 H11 119.1 . . ?
N1S C11S H11A 109.5 . . ?
N1S C11S H11B 109.5 . . ?
H11A C11S H11B 109.5 . . ?
N1S C11S H11C 109.5 . . ?
H11A C11S H11C 109.5 . . ?
H11B C11S H11C 109.5 . . ?
C13 C12 C10 119.6(15) . . ?
C13 C12 H12 120.2 . . ?
C10 C12 H12 120.2 . . ?
N1S C12S H12A 109.5 . . ?
N1S C12S H12B 109.5 . . ?
H12A C12S H12B 109.5 . . ?
N1S C12S H12C 109.5 . . ?
H12A C12S H12C 109.5 . . ?
H12B C12S H12C 109.5 . . ?
C12 C13 C11 119.5(17) . . ?
C12 C13 C14 122.1(17) . . ?
C11 C13 C14 118.4(17) . . ?
O1S C13S N1S 118(3) . . ?
O1S C13S H13S 121.2 . . ?
N1S C13S H13S 121.2 . . ?
O40 C14 C14A 121.4(19) . . ?
O40 C14 C13 121.1(19) . . ?
C14A C14 C13 117.4(19) . . ?
C14 C14A H14A 109.5 . . ?
C14 C14A H14B 109.5 . . ?
H14A C14A H14B 109.5 . . ?
C14 C14A H14C 109.5 . . ?
H14A C14A H14C 109.5 . . ?
H14B C14A H14C 109.5 . . ?
C17 C15 C16 119.0(15) . . ?
C17 C15 P3 120.1(11) . . ?
C16 C15 P3 120.9(12) . . ?
C18 C16 C15 120.7(16) . . ?
C18 C16 H16 119.6 . . ?
C15 C16 H16 119.6 . . ?
C15 C17 C19 121.0(14) . . ?
C15 C17 H17 119.5 . . ?
C19 C17 H17 119.5 . . ?
C16 C18 C20 119.0(17) . . ?
C16 C18 H18 120.5 . . ?
C20 C18 H18 120.5 . . ?
C20 C19 C17 119.5(15) . . ?
C20 C19 H19 120.3 . . ?
C17 C19 H19 120.3 . . ?
C19 C20 C18 120.5(16) . . ?
C19 C20 C21 121.0(17) . . ?
C18 C20 C21 118.4(17) . . ?
O42 C21 C21A 122(2) . . ?
O42 C21 C20 119(2) . . ?
C21A C21 C20 119(2) . . ?
C21 C21A H21D 109.5 . . ?
C21 C21A H21E 109.5 . . ?
H21D C21A H21E 109.5 . . ?
C21 C21A H21F 109.5 . . ?
```

```
H21D C21A H21F 109.5 . . ?
H21E C21A H21F 109.5 . . ?
N2S C21S H21A 109.5 . . ?
N2S C21S H21B 109.5 . . ?
H21A C21S H21B 109.5 . . ?
N2S C21S H21C 109.5 . . ?
H21A C21S H21C 109.5 . . ?
H21B C21S H21C 109.5 . . ?
N2S C22S H22C 109.5 . . ?
N2S C22S H22D 109.5 . . ?
H22C C22S H22D 109.5 . . ?
N2S C22S H22E 109.4 . . ?
H22C C22S H22E 109.5 . . ?
H22D C22S H22E 109.5 . . ?
O2S C23S N2S 86(6) . . ?
O2S C23S H23S 137.1 . . ?
N2S C23S H23S 137.1 . . ?
C26 N1 C22 113(3) . . ?
C26 N1 C34 109(2) . . ?
C22 N1 C34 111(2) . . ?
C26 N1 C30 110(3) . . ?
C22 N1 C30 105(2) . . ?
C34 N1 C30 108(2) . . ?
N1 C22 C23 113(2) . . ?
N1 C22 H22A 108.9 . . ?
C23 C22 H22A 108.9 . . ?
N1 C22 H22B 109.0 . . ?
C23 C22 H22B 109.0 . . ?
H22A C22 H22B 107.8 . . ?
C22 C23 C24 105(2) . . ?
C22 C23 H23A 110.7 . . ?
C24 C23 H23A 110.7 . . ?
C22 C23 H23B 110.7 . . ?
C24 C23 H23B 110.7 . . ?
H23A C23 H23B 108.8 . . ?
C23 C24 C25 102(2) . . ?
C23 C24 H24A 111.4 . . ?
C25 C24 H24A 111.4 . . ?
C23 C24 H24B 111.3 . . ?
C25 C24 H24B 111.3 . . ?
H24A C24 H24B 109.2 . . ?
C24 C25 H25A 109.5 . . ?
C24 C25 H25B 109.5 . . ?
H25A C25 H25B 109.5 . . ?
C24 C25 H25C 109.5 . . ?
H25A C25 H25C 109.5 . . ?
H25B C25 H25C 109.5 . . ?
N1 C26 C27 113(2) . . ?
N1 C26 H26A 109.0 . . ?
C27 C26 H26A 109.0 . . ?
N1 C26 H26B 109.0 . . ?
C27 C26 H26B 109.0 . . ?
H26A C26 H26B 107.8 . . ?
C28 C27 C26 111(3) . . ?
C28 C27 H27A 109.4 . . ?
C26 C27 H27A 109.3 . . ?
C28 C27 H27B 109.3 . . ?
C26 C27 H27B 109.3 . . ?
H27A C27 H27B 108.0 . . ?
C27 C28 C29 110(4) . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C29 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.6 . . ?
C29 C28 H28B 109.6 . . ?
H28A C28 H28B 108.1 . . ?
C28 C29 H29A 109.5 . . ?
```

```
C28 C29 H29B 109.4 . . ?
H29A C29 H29B 109.5 . . ?
C28 C29 H29C 109.5 . . ?
H29A C29 H29C 109.5 . . ?
H29B C29 H29C 109.5 . . ?
C31 C30 N1 122(2) . . ?
C31 C30 H30A 106.7 . . ?
N1 C30 H30A 106.7 . . ?
C31 C30 H30B 106.7 . . ?
N1 C30 H30B 106.7 . . ?
H30A C30 H30B 106.6 . . ?
C32 C31 C30 113(3) . . ?
C32 C31 H31A 108.9 . . ?
C30 C31 H31A 108.9 . . ?
C32 C31 H31B 108.9 . . ?
C30 C31 H31B 108.9 . . ?
H31A C31 H31B 107.7 . . ?
N3S C31S H31C 109.5 . . ?
N3S C31S H31D 109.5 . . ?
H31C C31S H31D 109.5 . . ?
N3S C31S H31E 109.5 . . ?
H31C C31S H31E 109.5 . . ?
H31D C31S H31E 109.5 . . ?
C33 C32 C31 126(4) . . ?
C33 C32 H32A 105.7 . . ?
C31 C32 H32A 105.7 . . ?
C33 C32 H32B 105.8 . . ?
C31 C32 H32B 105.8 . . ?
H32A C32 H32B 106.2 . . ?
N3S C32S H32C 109.5 . . ?
N3S C32S H32D 109.5 . . ?
H32C C32S H32D 109.5 . . ?
N3S C32S H32E 109.5 . . ?
H32C C32S H32E 109.5 . . ?
H32D C32S H32E 109.5 . . ?
C32 C33 H33A 109.5 . . ?
C32 C33 H33B 109.5 . . ?
H33A C33 H33B 109.5 . . ?
C32 C33 H33C 109.5 . . ?
H33A C33 H33C 109.5 . . ?
H33B C33 H33C 109.5 . . ?
O3S C33S N3S 124(4) . . ?
O3S C33S H33S 118.0 . . ?
N3S C33S H33S 118.0 . . ?
C35 C34 N1 119(2) . . ?
C35 C34 H34A 107.5 . . ?
N1 C34 H34A 107.5 . . ?
C35 C34 H34B 107.5 . . ?
N1 C34 H34B 107.5 . . ?
H34A C34 H34B 107.0 . . ?
O3SA C34S N3SA 127(5) . . ?
O3SA C34S H34S 116.3 . . ?
N3SA C34S H34S 116.3 . . ?
C34 C35 C36 111(2) . . ?
C34 C35 H35A 109.5 . . ?
C36 C35 H35A 109.5 . . ?
C34 C35 H35B 109.5 . . ?
C36 C35 H35B 109.5 . . ?
H35A C35 H35B 108.1 . . ?
N3SA C35S H35C 109.5 . . ?
N3SA C35S H35D 109.5 . . ?
H35C C35S H35D 109.5 . . ?
N3SA C35S H35E 109.5 . . ?
H35C C35S H35E 109.5 . . ?
H35D C35S H35E 109.5 . . ?
C35 C36 C37 117(3) . . ?
```

```
C35 C36 H36A 108.1 . . ?
C37 C36 H36A 108.1 . . ?
C35 C36 H36B 108.1 . . ?
C37 C36 H36B 108.1 . . ?
H36A C36 H36B 107.3 . . ?
N3SA C36S H36C 109.5 . . ?
N3SA C36S H36D 109.5 . . ?
H36C C36S H36D 109.5 . . ?
N3SA C36S H36E 109.5 . . ?
H36C C36S H36E 109.5 . . ?
H36D C36S H36E 109.5 . . ?
C36 C37 H37A 109.4 . . ?
C36 C37 H37B 109.5 . . ?
H37A C37 H37B 109.5 . . ?
C36 C37 H37C 109.5 . . ?
H37A C37 H37C 109.5 . . ?
H37B C37 H37C 109.5 . . ?
C39 C38 N2 122(4) . . ?
C39 C38 H38A 106.8 . . ?
N2 C38 H38A 106.7 . . ?
C39 C38 H38B 106.7 . . ?
N2 C38 H38B 106.7 . . ?
H38A C38 H38B 106.7 . . ?
C38 C39 C40 113(5) . . ?
C38 C39 H39A 108.9 . . ?
C40 C39 H39A 108.9 . . ?
C38 C39 H39B 109.0 . . ?
C40 C39 H39B 109.0 . . ?
H39A C39 H39B 107.8 . . ?
C41 C40 C39 99(4) . . ?
C41 C40 H40A 111.8 . . ?
C39 C40 H40A 111.8 . . ?
C41 C40 H40B 112.0 . . ?
C39 C40 H40B 111.9 . . ?
H40A C40 H40B 109.6 . . ?
C40 C41 H41A 109.4 . . ?
C40 C41 H41B 109.6 . . ?
H41A C41 H41B 109.5 . . ?
C40 C41 H41C 109.4 . . ?
H41A C41 H41C 109.5 . . ?
H41B C41 H41C 109.5 . . ?
N4S C41S C42S 33.1(14) . . ?
O4S C43S N4S 126(2) . . ?
C42 N2 C46 105(3) . . ?
C42 N2 C38 107(3) . . ?
C46 N2 C38 122(2) . . ?
C42 N2 C50 109(2) . . ?
C46 N2 C50 98(2) . . ?
C38 N2 C50 116(2) . . ?
N2 C42 C43 122(3) . . ?
N2 C42 H42A 106.8 . . ?
C43 C42 H42A 106.8 . . ?
N2 C42 H42B 106.8 . . ?
C43 C42 H42B 106.8 . . ?
H42A C42 H42B 106.7 . . ?
C42 C43 C44 103.3(19) . . ?
C42 C43 H43A 111.1 . . ?
C44 C43 H43A 111.1 . . ?
C42 C43 H43B 111.1 . . ?
C44 C43 H43B 111.1 . . ?
H43A C43 H43B 109.1 . . ?
C43 C44 C45 102.7(19) . . ?
C43 C44 H44A 111.3 . . ?
C45 C44 H44A 111.2 . . ?
C43 C44 H44B 111.2 . . ?
C45 C44 H44B 111.2 . . ?
```

```
H44A C44 H44B 109.1 . . ?
C44 C45 H45A 109.5 . . ?
C44 C45 H45B 109.5 . . ?
H45A C45 H45B 109.5 . . ?
C44 C45 H45C 109.4 . . ?
H45A C45 H45C 109.5 . . ?
H45B C45 H45C 109.5 . . ?
N2 C46 C47 104.5(15) . . ?
N2 C46 H46A 110.7 . . ?
C47 C46 H46A 110.7 . . ?
N2 C46 H46B 111.0 . . ?
C47 C46 H46B 111.0 . . ?
H46A C46 H46B 108.9 . . ?
C46 C47 C48 103.6(12) . . ?
C46 C47 H47A 111.0 . . ?
C48 C47 H47A 111.0 . . ?
C46 C47 H47B 111.0 . . ?
C48 C47 H47B 111.1 . . ?
H47A C47 H47B 109.0 . . ?
C47 C48 C49 98.1(10) . . ?
C47 C48 H48A 112.1 . . ?
C49 C48 H48A 112.1 . . ?
C47 C48 H48B 112.2 . . ?
C49 C48 H48B 112.2 . . ?
H48A C48 H48B 109.8 . . ?
C48 C49 H49A 109.5 . . ?
C48 C49 H49B 109.4 . . ?
H49A C49 H49B 109.5 . . ?
C48 C49 H49C 109.5 . . ?
H49A C49 H49C 109.5 . . ?
H49B C49 H49C 109.5 . . ?
C50 C51 C52 123(4) . . ?
C50 C51 H51A 106.6 . . ?
C52 C51 H51A 106.7 . . ?
C50 C51 H51B 106.6 . . ?
C52 C51 H51B 106.7 . . ?
H51A C51 H51B 106.6 . . ?
N5S C51S H51C 109.5 . . ?
N5S C51S H51D 109.5 . . ?
H51C C51S H51D 109.5 . . ?
N5S C51S H51E 109.5 . . ?
H51C C51S H51E 109.5 . . ?
H51D C51S H51E 109.5 . . ?
C51 C52 C53 119(4) . . ?
C51 C52 H52A 107.5 . . ?
C53 C52 H52A 107.5 . . ?
C51 C52 H52B 107.4 . . ?
C53 C52 H52B 107.5 . . ?
H52A C52 H52B 107.0 . . ?
N5S C52S H52C 109.5 . . ?
N5S C52S H52D 109.5 . . ?
H52C C52S H52D 109.5 . . ?
N5S C52S H52E 109.5 . . ?
H52C C52S H52E 109.5 . . ?
H52D C52S H52E 109.5 . . ?
C52 C53 H53A 109.4 . . ?
C52 C53 H53B 109.5 . . ?
H53A C53 H53B 109.5 . . ?
C52 C53 H53C 109.5 . . ?
H53A C53 H53C 109.5 . . ?
H53B C53 H53C 109.5 . . ?
C55 C54 N3 94.5(10) . . ?
C55 C54 H54A 112.8 . . ?
N3 C54 H54A 112.8 . . ?
C55 C54 H54B 112.9 . . ?
N3 C54 H54B 112.8 . . ?
```

```
H54A C54 H54B 110.3 . . ?
C56 C55 C54 108(2) . . ?
C56 C55 H55A 110.0 . . ?
C54 C55 H55A 110.0 . . ?
C56 C55 H55B 110.1 . . ?
C54 C55 H55B 110.1 . . ?
H55A C55 H55B 108.4 . . ?
C55 C56 C57 96(2) . . ?
C55 C56 H56A 112.6 . . ?
C57 C56 H56A 112.4 . . ?
C55 C56 H56B 112.6 . . ?
C57 C56 H56B 112.9 . . ?
H56A C56 H56B 110.1 . . ?
C56 C57 H57A 109.4 . . ?
C56 C57 H57B 109.3 . . ?
H57A C57 H57B 109.5 . . ?
C56 C57 H57C 109.7 . . ?
H57A C57 H57C 109.5 . . ?
H57B C57 H57C 109.5 . . ?
C59 C58 N3 95.8(10) . . ?
C59 C58 H58A 112.6 . . ?
N3 C58 H58A 112.6 . . ?
C59 C58 H58B 112.6 . . ?
N3 C58 H58B 112.6 . . ?
H58A C58 H58B 110.1 . . ?
C60 C59 C58 106(2) . . ?
C60 C59 H59A 110.5 . . ?
C58 C59 H59A 110.5 . . ?
C60 C59 H59B 110.6 . . ?
C58 C59 H59B 110.6 . . ?
H59A C59 H59B 108.7 . . ?
C59 C60 C61 117(3) . . ?
C59 C60 H60A 108.2 . . ?
C61 C60 H60A 108.2 . . ?
C59 C60 H60B 108.1 . . ?
C61 C60 H60B 108.1 . . ?
H60A C60 H60B 107.3 . . ?
C60 C61 H61A 109.5 . . ?
C60 C61 H61B 109.6 . . ?
H61A C61 H61B 109.5 . . ?
C60 C61 H61C 109.4 . . ?
H61A C61 H61C 109.5 . . ?
H61B C61 H61C 109.5 . . ?
C13S N1S C12S 121(3) . . ?
C13S N1S C11S 115(3) . . ?
C12S N1S C11S 122(3) . . ?
C23S N2S C21S 94(5) . . ?
C23S N2S C22S 132(6) . . ?
C21S N2S C22S 131(5) . . ?
C58 N3 C58 123.5(15) . 2_755 ?
C58 N3 C54 120.6(8) . 2_755 ?
C58 N3 C54 86.8(10) 2_755 2_755 ?
C58 N3 C54 86.8(10) . . ?
C58 N3 C54 120.6(8) 2_755 . ?
C54 N3 C54 122.8(15) 2_755 . ?
C33S N3S C31S 120(3) . . ?
C33S N3S C32S 118(3) . . ?
C31S N3S C32S 119(3) . . ?
C36S N3SA C35S 119(5) . . ?
C36S N3SA C34S 117(5) . . ?
C35S N3SA C34S 124(5) . . ?
C53S N5S C52S 127.5(18) . . ?
C53S N5S C51S 114.7(17) . . ?
C52S N5S C51S 117.8(15) . . ?
W2 O2 W1 115.7(5) . . ?
O3SA O3S C33S 145(4) . . ?
```

```
O3SA O3S Co2 66(2) . . ?
C33S O3S Co2 128(3) . . ?
W2 O4 W3 148.2(5) . . ?
O3S O3SA C34S 127(4) . . ?
O3S O3SA Co2 85(3) . . ?
C34S O3SA Co2 138(3) . . ?
O3S O3SA Co2 104(3) . 2_656 ?
C34S O3SA Co2 124(3) . 2_656 ?
Co2 O3SA Co2 20.0(4) . 2_656 ?
C43S O4S Co2 127.9(16) . . ?
C43S O4S Co2 129.1(15) . 2_656 ?
Co2 O4S Co2 16.2(3) . 2_656 ?
C53S O5S Co2 126.2(15) . . ?
C53S O5S Co2 111.1(14) . 2_656 ?
Co2 O5S Co2 15.3(3) . 2_656 ?
W3 O6 W4 116.4(5) . . ?
W4 O8 W5 148.0(6) . . ?
W5 O10 W6 115.7(5) . . ?
W6 O12 W1 148.8(5) . . ?
Si1 O13 W2 128.4(5) . . ?
Si1 O13 W1 127.9(5) . . ?
W2 O13 W1 93.2(3) . . ?
Si1 O14 W4 127.9(5) . . ?
Si1 O14 W3 127.5(5) . . ?
W4 O14 W3 93.1(3) . . ?
Si1 O15 W6 127.7(6) . . ?
Si1 O15 W5 127.6(5) . . ?
W6 O15 W5 93.3(3) . . ?
Si1 O16 W8 124.1(5) . . ?
Si1 O16 W9 123.4(5) . . ?
W8 O16 W9 92.6(3) . . ?
Si1 O16 W7 123.0(5) . . ?
W8 O16 W7 92.5(3) . . ?
W9 O16 W7 92.4(3) . . ?
W1 O17 W9 149.7(6) . . ?
W2 O18 W7 149.2(6) . . ?
W3 O19 W7 150.6(5) . . ?
W8 O20 W4 150.6(5) . . ?
W5 O21 W8 150.1(5) . . ?
W6 O22 W9 149.6(5) . . ?
W7 O23 W9 120.5(5) . . ?
W8 O25 W7 121.1(5) . . ?
W9 O27 W8 121.0(5) . . ?
P1 O29 W1 132.5(5) . . ?
P1 O30 W2 133.6(6) . . ?
P1 O31 Co1 170.9(6) . . ?
P2 O32 W3 134.0(6) . . ?
P2 O33 W4 133.8(6) . . ?
P2 O34 Co1 171.0(6) . . ?
P3 O35 W5 132.2(6) . . ?
P3 O36 W6 133.4(6) . . ?
P3 O37 Co1 170.1(6) . . ?
O15 Si1 O14 113.1(5) . . ?
O15 Si1 O13 113.6(5) . . ?
O14 Si1 O13 113.4(5) . . ?
O15 Si1 O16 105.2(5) . . ?
O14 Si1 O16 105.4(5) . . ?
O13 Si1 O16 105.1(5) . . ?
O31 P1 O30 114.5(6) . . ?
O31 P1 O29 115.7(6) . . ?
O30 P1 O29 106.4(5) . . ?
O31 P1 C1 110.4(6) . . ?
O30 P1 C1 104.6(6) . . ?
O29 P1 C1 104.2(6) . . ?
O34 P2 O32 115.0(6) . . ?
O34 P2 O33 114.0(5) . . ?
```

```
O32 P2 O33 106.3(5) . . ?
O34 P2 C8 111.1(6) . . ?
O32 P2 C8 104.8(6) . . ?
O33 P2 C8 104.8(6) . . ?
O37 P3 O36 114.6(6) . . ?
O37 P3 O35 114.5(5) . . ?
O36 P3 O35 107.0(5) . . ?
O37 P3 C15 110.5(6) . . ?
O36 P3 C15 103.7(6) . . ?
O35 P3 C15 105.6(6) . . ?
O34 Co1 O34 180.0(6) . 7_655 ?
O34 Co1 O37 89.0(3) . . ?
O34 Co1 O37 91.0(3) 7_655 . ?
O34 Co1 O37 91.0(3) . 7_655 ?
O34 Co1 O37 89.0(3) 7_655 7_655 ?
O37 Co1 O37 180.0(3) . 7_655 ?
O34 Co1 O31 91.5(3) . 7_655 ?
O34 Co1 O31 88.5(3) 7_655 7_655 ?
O37 Co1 O31 91.8(3) . 7_655 ?
O37 Co1 O31 88.2(3) 7_655 7_655 ?
O34 Co1 O31 88.5(3) . . ?
O34 Co1 O31 91.5(3) 7_655 . ?
O37 Co1 O31 88.2(3) . . ?
O37 Co1 O31 91.8(3) 7_655 . ?
O31 Co1 O31 180.0(5) 7_655 . ?
Co2 Co2 O3SA 96.6(11) 2_656 . ?
Co2 Co2 O5S 120.6(12) 2_656 . ?
O3SA Co2 O5S 110.7(10) . . ?
Co2 Co2 O4S 116.2(8) 2_656 . ?
O3SA Co2 O4S 111.6(11) . . ?
O5S Co2 O4S 101.3(7) . . ?
Co2 Co2 O3S 124.7(11) 2_656 . ?
O3SA Co2 O3S 29.4(9) . . ?
O5S Co2 O3S 98.8(9) . . ?
O4S Co2 O3S 88.8(9) . . ?
Co2 Co2 O3SA 63.4(10) 2_656 2_656 ?
O3SA Co2 O3SA 61.3(18) . 2_656 ?
O5S Co2 O3SA 84.9(10) . 2_656 ?
O4S Co2 O3SA 172.1(10) . 2_656 ?
O3S Co2 O3SA 85.4(14) . 2_656 ?
Co2 Co2 O4S 47.6(7) 2_656 2_656 ?
O3SA Co2 O4S 143.4(11) . 2_656 ?
O5S Co2 O4S 87.4(6) . 2_656 ?
O4S Co2 O4S 94.6(8) . 2_656 ?
O3S Co2 O4S 172.2(9) . 2_656 ?
O3SA Co2 O4S 90.4(10) 2_656 2_656 ?
Co2 Co2 O5S 44.1(10) 2_656 2_656 ?
O3SA Co2 O5S 78.4(10) . 2_656 ?
O5S Co2 O5S 164.3(4) . 2_656 ?
O4S Co2 O5S 86.4(6) . 2_656 ?
O3S Co2 O5S 95.0(9) . 2_656 ?
O3SA Co2 O5S 88.7(9) 2_656 2_656 ?
O4S Co2 O5S 78.2(6) 2_656 2_656 ?
O1 W1 O17 100.4(4) . . ?
O1 W1 O12 101.1(5) . . ?
O17 W1 O12 88.1(4) . . ?
O1 W1 O2 99.0(5) . . ?
O17 W1 O2 92.0(4) . . ?
O12 W1 O2 159.6(4) . . ?
O1 W1 O29 95.8(4) . . ?
O17 W1 O29 163.8(4) . . ?
O12 W1 O29 87.7(4) . . ?
O2 W1 O29 86.7(4) . . ?
O1 W1 O13 172.6(4) . . ?
O17 W1 O13 84.7(4) . . ?
O12 W1 O13 84.4(4) . . ?
```

```
O2 W1 O13 75.4(4) . . ?
O29 W1 O13 79.4(3) . . ?
O3 W2 O4 100.6(5) . . ?
O3 W2 O18 100.1(4) . . ?
O4 W2 O18 88.3(4) . . ?
O3 W2 O2 98.9(5) . . ?
O4 W2 O2 160.5(4) . . ?
O18 W2 O2 89.6(4) . . ?
O3 W2 O30 96.6(4) . . ?
O4 W2 O30 89.9(4) . . ?
O18 W2 O30 163.3(4) . . ?
O2 W2 O30 86.6(4) . . ?
O3 W2 O13 172.9(4) . . ?
O4 W2 O13 85.0(4) . . ?
O18 W2 O13 84.3(4) . . ?
O2 W2 O13 75.5(4) . . ?
O30 W2 O13 79.0(3) . . ?
O5 W3 O19 100.2(4) . . ?
O5 W3 O6 99.6(5) . . ?
O19 W3 O6 92.1(4) . . ?
O5 W3 O4 100.6(5) . . ?
O19 W3 O4 87.5(4) . . ?
O6 W3 O4 159.5(4) . . ?
O5 W3 O32 96.2(4) . . ?
O19 W3 O32 163.6(4) . . ?
O6 W3 O32 86.1(4) . . ?
O4 W3 O32 88.5(4) . . ?
O5 W3 O14 172.8(4) . . ?
O19 W3 O14 85.0(4) . . ?
O6 W3 O14 75.1(4) . . ?
O4 W3 O14 84.4(4) . . ?
O32 W3 O14 78.8(4) . . ?
O7 W4 O8 100.7(5) . . ?
O7 W4 O6 99.3(5) . . ?
O8 W4 O6 160.0(4) . . ?
O7 W4 O20 99.9(4) . . ?
O8 W4 O20 87.7(4) . . ?
O6 W4 O20 89.8(4) . . ?
O7 W4 O33 96.6(4) . . ?
O8 W4 O33 90.8(4) . . ?
O6 W4 O33 86.0(4) . . ?
O20 W4 O33 163.4(4) . . ?
O7 W4 O14 173.2(4) . . ?
O8 W4 O14 84.8(4) . . ?
O6 W4 O14 75.2(4) . . ?
O20 W4 O14 84.3(4) . . ?
O33 W4 O14 79.2(4) . . ?
O9 W5 O21 99.9(5) . . ?
O9 W5 O8 100.4(5) . . ?
O21 W5 O8 87.8(4) . . ?
O9 W5 O10 99.7(5) . . ?
O21 W5 O10 92.0(4) . . ?
O8 W5 O10 159.6(4) . . ?
O9 W5 O35 95.5(4) . . ?
O21 W5 O35 164.6(4) . . ?
O8 W5 O35 88.3(4) . . ?
O10 W5 O35 86.5(4) . . ?
O9 W5 O15 173.1(4) . . ?
O21 W5 O15 85.4(4) . . ?
O8 W5 O15 84.2(4) . . ?
O10 W5 O15 75.4(4) . . ?
O35 W5 O15 79.4(3) . . ?
O11 W6 O12 100.7(5) . . ?
O11 W6 O22 99.8(4) . . ?
O12 W6 O22 87.9(4) . . ?
O11 W6 O10 98.9(5) . . ?
```

```
O12 W6 O10 160.3(4) . . ?
O22 W6 O10 88.3(4) . . ?
O11 W6 O36 97.0(4) . . ?
O12 W6 O36 90.5(4) . . ?
O22 W6 O36 163.1(4) . . ?
O10 W6 O36 87.5(4) . . ?
O11 W6 O15 173.0(5) . . ?
O12 W6 O15 85.2(4) . . ?
O22 W6 O15 84.2(4) . . ?
O10 W6 O15 75.2(4) . . ?
O36 W6 O15 79.0(4) . . ?
O24 W7 O23 99.4(5) . . ?
O24 W7 O19 101.5(5) . . ?
O23 W7 O19 159.0(4) . . ?
O24 W7 O18 101.2(4) . . ?
O23 W7 O18 90.8(4) . . ?
O19 W7 O18 84.1(4) . . ?
O24 W7 O25 99.3(5) . . ?
O23 W7 O25 88.8(4) . . ?
O19 W7 O25 88.8(4) . . ?
O18 W7 O25 159.3(4) . . ?
O24 W7 O16 169.1(4) . . ?
O23 W7 O16 73.5(4) . . ?
O19 W7 O16 85.9(4) . . ?
O18 W7 O16 87.4(4) . . ?
O25 W7 O16 72.7(4) . . ?
O26 W8 O20 101.6(5) . . ?
O26 W8 O25 98.8(5) . . ?
O20 W8 O25 91.5(4) . . ?
O26 W8 O21 102.0(5) . . ?
O20 W8 O21 83.7(4) . . ?
O25 W8 O21 159.2(4) . . ?
O26 W8 O27 99.3(5) . . ?
O20 W8 O27 158.7(4) . . ?
O25 W8 O27 89.0(4) . . ?
O21 W8 O27 88.3(4) . . ?
O26 W8 O16 169.1(4) . . ?
O20 W8 O16 86.8(4) . . ?
O25 W8 O16 73.7(4) . . ?
O21 W8 O16 85.8(4) . . ?
O27 W8 O16 73.0(4) . . ?
O28 W9 O27 99.4(5) . . ?
O28 W9 O22 101.3(4) . . ?
O27 W9 O22 91.1(4) . . ?
O28 W9 O23 99.1(5) . . ?
O27 W9 O23 89.3(4) . . ?
O22 W9 O23 159.2(4) . . ?
O28 W9 O17 101.3(4) . . ?
O27 W9 O17 159.2(4) . . ?
O22 W9 O17 84.3(4) . . ?
O23 W9 O17 88.0(4) . . ?
O28 W9 O16 169.5(4) . . ?
O27 W9 O16 73.4(4) . . ?
O22 W9 O16 86.7(4) . . ?
O23 W9 O16 73.6(4) . . ?
O17 W9 O16 86.1(4) . . ?
C42S N4S C43S 131(3) . . ?
C42S N4S C41S 107(3) . . ?
C43S N4S C41S 122(2) . . ?
O5S C53S N5S 116(2) . . ?
C51 C50 N2 129(3) . . ?
C51 C50 H50A 105.1 . . ?
N2 C50 H50A 105.1 . . ?
C51 C50 H50B 105.0 . . ?
N2 C50 H50B 105.0 . . ?
H50A C50 H50B 105.9 . . ?
```

```
N4S C42S C41S 40.0(17) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
C3 C1 C2 C4 -1(3) . . . . ?
P1 C1 C2 C4 178.3(15) . . . . ?
C2 C1 C3 C5 0(3) . . . . ?
P1 C1 C3 C5 -179.0(14) . . . . ?
C1 C2 C4 C6 0(3) . . . . ?
C1 C3 C5 C6 1(3) . . . . ?
C2 C4 C6 C5 1(4) . . . . ?
C2 C4 C6 C7 -178(2) . . . . ?
C3 C5 C6 C4 -1(3) . . . . ?
C3 C5 C6 C7 177(2) . . . . ?
C4 C6 C7 O38 -9(5) . . . . ?
C5 C6 C7 O38 173(3) . . . . ?
C4 C6 C7 C8A 175(3) . . . . ?
C5 C6 C7 C8A -3(4) . . . . ?
C10 C8 C9 C11 -3(3) . . . . ?
P2 C8 C9 C11 177(2) . . . . ?
C9 C8 C10 C12 3(3) . . . . ?
P2 C8 C10 C12 -176.0(13) . . . . ?
C8 C9 C11 C13 1(4) . . . . ?
C8 C10 C12 C13 -2(3) . . . . ?
C10 C12 C13 C11 0(3) . . . . ?
C10 C12 C13 C14 -179.5(19) . . . . ?
C9 C11 C13 C12 1(4) . . . . ?
C9 C11 C13 C14 -180(3) . . . . ?
C12 C13 C14 O40 -172(3) . . . . ?
C11 C13 C14 O40 8(4) . . . . ?
C12 C13 C14 C14A 4(3) . . . . ?
C11 C13 C14 C14A -176(2) . . . . ?
C17 C15 C16 C18 1(3) . . . . ?
P3 C15 C16 C18 -179.2(16) . . . . ?
C16 C15 C17 C19 -2(3) . . . . ?
P3 C15 C17 C19 178.9(14) . . . . ?
C15 C16 C18 C20 -3(3) . . . . ?
C15 C17 C19 C20 4(3) . . . . ?
C17 C19 C20 C18 -6(3) . . . . ?
C17 C19 C20 C21 178(2) . . . . ?
C16 C18 C20 C19 5(3) . . . . ?
C16 C18 C20 C21 -178(2) . . . . ?
C19 C20 C21 O42 -178(3) . . . . ?
C18 C20 C21 O42 6(5) . . . . ?
C19 C20 C21 C21A -2(4) . . . . ?
C18 C20 C21 C21A -178(2) . . . . ?
C26 N1 C22 C23 61(4) . . . . ?
C34 N1 C22 C23 -62(4) . . . . ?
C30 N1 C22 C23 -179(3) . . . . ?
N1 C22 C23 C24 172(3) . . . . ?
C22 C23 C24 C25 -172(3) . . . . ?
C22 N1 C26 C27 50(5) . . . . ?
C34 N1 C26 C27 174(3) . . . . ?
C30 N1 C26 C27 -67(4) . . . . ?
N1 C26 C27 C28 170(4) . . . . ?
C26 C27 C28 C29 176(5) . . . . ?
C26 N1 C30 C31 -50(4) . . . . ?
```

```
C22 N1 C30 C31 -172(3) . . . . ?
C34 N1 C30 C31 70(3) . . . . ?
N1 C30 C31 C32 178(3) . . . . ?
C30 C31 C32 C33 54(6) . . . . ?
C26 N1 C34 C35 -176(3) . . . . ?
C22 N1 C34 C35 -50(4) . . . . ?
C30 N1 C34 C35 64(3) . . . . ?
N1 C34 C35 C36 -175(3) . . . . ?
C34 C35 C36 C37 -177(3) . . . . ?
N2 C38 C39 C40 168(5) . . . . ?
C38 C39 C40 C41 -122(8) . . . . ?
C39 C38 N2 C42 64(6) . . . . ?
C39 C38 N2 C46 -175(5) . . . . ?
C39 C38 N2 C50 -57(5) . . . . ?
C46 N2 C42 C43 -88(5) . . . . ?
C38 N2 C42 C43 43(5) . . . . ?
C50 N2 C42 C43 168(4) . . . . ?
N2 C42 C43 C44 -169(4) . . . . ?
C42 C43 C44 C45 178(4) . . . . ?
C42 N2 C46 C47 169(2) . . . . ?
C38 N2 C46 C47 48(3) . . . . ?
C50 N2 C46 C47 -79(2) . . . . ?
N2 C46 C47 C48 -103.3(18) . . . . ?
C46 C47 C48 C49 -130.0(12) . . . . ?
C50 C51 C52 C53 -170(5) . . . . ?
N3 C54 C55 C56 165(3) . . . . ?
C54 C55 C56 C57 -167(4) . . . . ?
N3 C58 C59 C60 170(2) . . . . ?
C58 C59 C60 C61 -166(3) . . . . ?
O1S C13S N1S C12S -14(5) . . . . ?
O1S C13S N1S C11S 177(3) . . . . ?
O2S C23S N2S C21S 175(5) . . . . ?
O2S C23S N2S C22S -25(8) . . . . ?
C59 C58 N3 C58 53.4(12) . . . 2_755 ?
C59 C58 N3 C54 -54.9(18) . . . 2_755 ?
C59 C58 N3 C54 178.5(15) . . . . ?
C55 C54 N3 C58 176.1(14) . . . . ?
C55 C54 N3 C58 -56.4(17) . . . 2_755 ?
C55 C54 N3 C54 51.3(12) . . . 2_755 ?
O3S C33S N3S C31S 2(6) . . . . ?
O3S C33S N3S C32S -161(3) . . . . ?
O3SA C34S N3SA C36S 2(8) . . . . ?
O3SA C34S N3SA C35S 174(5) . . . . ?
N3S C33S O3S O3SA 69(8) . . . . ?
N3S C33S O3S Co2 172(3) . . . . ?
C33S O3S O3SA C34S -86(8) . . . . ?
Co2 O3S O3SA C34S 151(5) . . . . ?
C33S O3S O3SA Co2 123(6) . . . . ?
C33S O3S O3SA Co2 117(6) . . . 2_656 ?
Co2 O3S O3SA Co2 -5.8(8) . . . 2_656 ?
N3SA C34S O3SA O3S 33(8) . . . . ?
N3SA C34S O3SA Co2 167(3) . . . . ?
N3SA C34S O3SA Co2 -174(3) . . . 2_656 ?
N4S C43S O4S Co2 -177.4(15) . . . . ?
N4S C43S O4S Co2 161.9(16) . . . 2_656 ?
W6 O15 Si1 O14 -177.4(5) . . . . ?
W5 O15 Si1 O14 49.2(8) . . . . ?
W6 O15 Si1 O13 -46.3(8) . . . . ?
W5 O15 Si1 O13 -179.6(6) . . . . ?
W6 O15 Si1 O16 68.1(7) . . . . ?
W5 O15 Si1 O16 -65.3(8) . . . . ?
W4 O14 Si1 O15 -47.5(7) . . . . ?
W3 O14 Si1 O15 179.4(5) . . . . ?
W4 O14 Si1 O13 -178.8(5) . . . . ?
W3 O14 Si1 O13 48.1(7) . . . . ?
W4 O14 Si1 O16 66.9(7) . . . . ?
```

```
W3 O14 Si1 O16 -66.3(7) . . . . ?
W2 O13 Si1 O15 -177.2(6) . . . . ?
W1 O13 Si1 O15 47.6(8) . . . . ?
W2 O13 Si1 O14 -46.2(8) . . . . ?
W1 O13 Si1 O14 178.7(5) . . . . ?
W2 O13 Si1 O16 68.4(7) . . . . ?
W1 O13 Si1 O16 -66.8(7) . . . . ?
W8 O16 Si1 O15 61.3(7) . . . . ?
W9 O16 Si1 O15 -59.5(7) . . . . ?
W7 O16 Si1 O15 -178.6(6) . . . . ?
W8 O16 Si1 O14 -58.4(7) . . . . ?
W9 O16 Si1 O14 -179.3(5) . . . . ?
W7 O16 Si1 O14 61.6(7) . . . . ?
W8 O16 Si1 O13 -178.5(6) . . . . ?
W9 O16 Si1 O13 60.7(7) . . . . ?
W7 O16 Si1 O13 -58.5(7) . . . . ?
Co1 O31 P1 O30 -112(4) . . . . ?
Co1 O31 P1 O29 124(4) . . . . ?
Co1 O31 P1 C1 6(4) . . . . ?
W2 O30 P1 O31 -94.7(9) . . . . ?
W2 O30 P1 O29 34.5(9) . . . . ?
W2 O30 P1 C1 144.4(8) . . . . ?
W1 O29 P1 O31 94.0(8) . . . . ?
W1 O29 P1 O30 -34.4(9) . . . . ?
W1 O29 P1 C1 -144.5(8) . . . . ?
C3 C1 P1 O31 -2.1(16) . . . . ?
C2 C1 P1 O31 178.9(13) . . . . ?
C3 C1 P1 O30 121.5(14) . . . . ?
C2 C1 P1 O30 -57.5(15) . . . . ?
C3 C1 P1 O29 -127.0(14) . . . . ?
C2 C1 P1 O29 54.0(15) . . . . ?
Co1 O34 P2 O32 126(4) . . . . ?
Co1 O34 P2 O33 -111(4) . . . . ?
Co1 O34 P2 C8 7(4) . . . . ?
W3 O32 P2 O34 94.4(8) . . . . ?
W3 O32 P2 O33 -32.7(9) . . . . ?
W3 O32 P2 C8 -143.3(8) . . . . ?
W4 O33 P2 O34 -94.4(8) . . . . ?
W4 O33 P2 O32 33.3(9) . . . . ?
W4 O33 P2 C8 143.9(8) . . . . ?
C10 C8 P2 O34 -6.1(15) . . . . ?
C9 C8 P2 O34 174.5(16) . . . . ?
C10 C8 P2 O32 -130.8(13) . . . . ?
C9 C8 P2 O32 49.8(18) . . . . ?
C10 C8 P2 O33 117.5(13) . . . . ?
C9 C8 P2 O33 -61.9(17) . . . . ?
Co1 O37 P3 O36 -106(4) . . . . ?
Co1 O37 P3 O35 130(4) . . . . ?
Co1 O37 P3 C15 11(4) . . . . ?
W6 O36 P3 O37 -94.8(8) . . . . ?
W6 O36 P3 O35 33.3(9) . . . . ?
W6 O36 P3 C15 144.7(8) . . . . ?
W5 O35 P3 O37 93.3(8) . . . . ?
W5 O35 P3 O36 -34.9(9) . . . . ?
W5 O35 P3 C15 -145.0(8) . . . . ?
C17 C15 P3 O37 6.3(16) . . . . ?
C16 C15 P3 O37 -173.0(13) . . . . ?
C17 C15 P3 O36 129.6(13) . . . . ?
C16 C15 P3 O36 -49.6(15) . . . . ?
C17 C15 P3 O35 -118.0(13) . . . . ?
C16 C15 P3 O35 62.8(15) . . . . ?
P2 O34 Co1 O34 -128(100) . . . 7_655 ?
P2 O34 Co1 O37 129(4) . . . . ?
P2 O34 Co1 O37 -51(4) . . . 7_655 ?
P2 O34 Co1 O31 37(4) . . . 7_655 ?
P2 O34 Co1 O31 -143(4) . . . . ?
```

```
P3 O37 Co1 O34 -149(4) . . . . ?
P3 O37 Co1 O34 31(4) . . . 7_655 ?
P3 O37 Co1 O37 69(100) . . . 7_655 ?
P3 O37 Co1 O31 -57(4) . . . 7_655 ?
P3 O37 Co1 O31 123(4) . . . . ?
P1 O31 Co1 O34 130(4) . . . . ?
P1 O31 Co1 O34 -50(4) . . . 7_655 ?
P1 O31 Co1 O37 -141(4) . . . . ?
P1 O31 Co1 O37 39(4) . . . 7_655 ?
P1 O31 Co1 O31 -91(14) . . . 7_655 ?
O3S O3SA Co2 Co2 -163(2) . . . 2_656 ?
C34S O3SA Co2 Co2 52(5) . . . 2_656 ?
O3S O3SA Co2 O5S 70(2) . . . . ?
C34S O3SA Co2 O5S -75(5) . . . . ?
Co2 O3SA Co2 O5S -126.3(13) 2_656 . . . ?
O3S O3SA Co2 O4S -42(3) . . . . ?
C34S O3SA Co2 O4S 173(5) . . . . ?
Co2 O3SA Co2 O4S 121.7(13) 2_656 . . . ?
C34S O3SA Co2 O3S -145(6) . . . . ?
Co2 O3SA Co2 O3S 163(2) 2_656 . . . ?
O3S O3SA Co2 O3SA 142(3) . . . 2_656 ?
C34S O3SA Co2 O3SA -3(4) . . . 2_656 ?
Co2 O3SA Co2 O3SA -54.7(17) 2_656 . . 2_656 ?
O3S O3SA Co2 O4S -174.4(18) . . . 2_656 ?
C34S O3SA Co2 O4S 41(6) . . . 2_656 ?
Co2 O3SA Co2 O4S -10.9(13) 2_656 . . 2_656 ?
O3S O3SA Co2 O5S -123(2) . . . 2_656 ?
C34S O3SA Co2 O5S 92(5) . . . 2_656 ?
Co2 O3SA Co2 O5S 40.3(10) 2_656 . . 2_656 ?
C53S O5S Co2 Co2 10(2) . . . 2_656 ?
C53S O5S Co2 O3SA 121(2) . . . . ?
Co2 O5S Co2 O3SA 111.6(12) 2_656 . . . ?
C53S O5S Co2 O4S -120.1(18) . . . . ?
Co2 O5S Co2 O4S -130.0(6) 2_656 . . . ?
C53S O5S Co2 O3S 149.3(19) . . . . ?
Co2 O5S Co2 O3S 139.5(9) 2_656 . . . ?
C53S O5S Co2 O3SA 65(2) . . . 2_656 ?
Co2 O5S Co2 O3SA 54.9(10) 2_656 . . 2_656 ?
C53S O5S Co2 O4S -26.0(18) . . . 2_656 ?
Co2 O5S Co2 O4S -35.8(5) 2_656 . . 2_656 ?
C53S O5S Co2 O5S -2(5) . . . 2_656 ?
Co2 O5S Co2 O5S -12(3) 2_656 . . 2_656 ?
C43S O4S Co2 Co2 -100(2) . . . 2_656 ?
C43S O4S Co2 O3SA 150(2) . . . . ?
Co2 O4S Co2 O3SA -109.5(16) 2_656 . . . ?
C43S O4S Co2 O5S 32(2) . . . . ?
Co2 O4S Co2 O5S 132.6(13) 2_656 . . . ?
C43S O4S Co2 O3S 131(2) . . . . ?
Co2 O4S Co2 O3S -128.6(14) 2_656 . . . ?
C43S O4S Co2 O3SA 174(7) . . . 2_656 ?
Co2 O4S Co2 O3SA -85(8) 2_656 . . 2_656 ?
C43S O4S Co2 O4S -56.1(18) . . . 2_656 ?
Co2 O4S Co2 O4S 44.3(10) 2_656 . . 2_656 ?
C43S O4S Co2 O5S -134(2) . . . 2_656 ?
Co2 O4S Co2 O5S -33.5(11) 2_656 . . 2_656 ?
O3SA O3S Co2 Co2 20(3) . . . 2_656 ?
C33S O3S Co2 Co2 -122(3) . . . 2_656 ?
C33S O3S Co2 O3SA -143(4) . . . . ?
O3SA O3S Co2 O5S -117(2) . . . . ?
C33S O3S Co2 O5S 100(3) . . . . ?
O3SA O3S Co2 O4S 142(2) . . . . ?
C33S O3S Co2 O4S -1(3) . . . . ?
O3SA O3S Co2 O3SA -33(3) . . . 2_656 ?
C33S O3S Co2 O3SA -175(3) . . . 2_656 ?
O3SA O3S Co2 O4S 25(8) . . . 2_656 ?
C33S O3S Co2 O4S -117(7) . . . 2_656 ?
```

```
O3SA O3S Co2 O5S 55(2) . . . 2_656 ?
C33S O3S Co2 O5S -87(3) . . . 2_656 ?
W9 O17 W1 O1 134.8(11) . . . . ?
W9 O17 W1 O12 33.9(11) . . . . ?
W9 O17 W1 O2 -125.7(11) . . . . ?
W9 O17 W1 O29 -41(2) . . . . ?
W9 O17 W1 O13 -50.6(11) . . . . ?
W6 O12 W1 O1 -123.7(10) . . . . ?
W6 O12 W1 O17 -23.5(10) . . . . ?
W6 O12 W1 O2 67.0(16) . . . . ?
W6 O12 W1 O29 140.9(11) . . . . ?
W6 O12 W1 O13 61.3(10) . . . . ?
W2 O2 W1 O1 -170.9(5) . . . . ?
W2 O2 W1 O17 88.3(5) . . . . ?
W2 O2 W1 O12 -1.5(13) . . . . ?
W2 O2 W1 O29 -75.5(5) . . . . ?
W2 O2 W1 O13 4.4(4) . . . . ?
P1 O29 W1 O1 150.5(8) . . . . ?
P1 O29 W1 O17 -33.8(19) . . . . ?
P1 O29 W1 O12 -108.6(8) . . . . ?
P1 O29 W1 O2 51.8(8) . . . . ?
P1 O29 W1 O13 -23.9(7) . . . . ?
Si1 O13 W1 O1 -177(3) . . . . ?
W2 O13 W1 O1 37(3) . . . . ?
Si1 O13 W1 O17 49.5(6) . . . . ?
W2 O13 W1 O17 -96.8(4) . . . . ?
Si1 O13 W1 O12 -39.0(6) . . . . ?
W2 O13 W1 O12 174.6(4) . . . . ?
Si1 O13 W1 O2 143.0(7) . . . . ?
W2 O13 W1 O2 -3.4(3) . . . . ?
Si1 O13 W1 O29 -127.7(7) . . . . ?
W2 O13 W1 O29 85.9(4) . . . . ?
W3 O4 W2 O3 123.9(11) . . . . ?
W3 O4 W2 O18 23.9(11) . . . . ?
W3 O4 W2 O2 -60.2(17) . . . . ?
W3 O4 W2 O30 -139.5(11) . . . . ?
W3 O4 W2 O13 -60.5(10) . . . . ?
W7 O18 W2 O3 -135.6(11) . . . . ?
W7 O18 W2 O4 -35.1(11) . . . . ?
W7 O18 W2 O2 125.5(11) . . . . ?
W7 O18 W2 O30 49(2) . . . . ?
W7 O18 W2 O13 50.0(10) . . . . ?
W1 O2 W2 O3 171.3(5) . . . . ?
W1 O2 W2 O4 -4.7(14) . . . . ?
W1 O2 W2 O18 -88.5(5) . . . . ?
W1 O2 W2 O30 75.2(5) . . . . ?
W1 O2 W2 O13 -4.4(4) . . . . ?
P1 O30 W2 O3 -150.2(8) . . . . ?
P1 O30 W2 O4 109.1(8) . . . . ?
P1 O30 W2 O18 25(2) . . . . ?
P1 O30 W2 O2 -51.7(8) . . . . ?
P1 O30 W2 O13 24.2(8) . . . . ?
Si1 O13 W2 O3 180(100) . . . . ?
W1 O13 W2 O3 -34(4) . . . . ?
Si1 O13 W2 O4 37.1(6) . . . . ?
W1 O13 W2 O4 -176.7(4) . . . . ?
Si1 O13 W2 O18 -51.7(7) . . . . ?
W1 O13 W2 O18 94.4(4) . . . . ?
Si1 O13 W2 O2 -142.7(7) . . . . ?
W1 O13 W2 O2 3.4(3) . . . . ?
Si1 O13 W2 O30 128.0(7) . . . . ?
W1 O13 W2 O30 -85.9(4) . . . . ?
W7 O19 W3 O5 135.5(11) . . . . ?
W7 O19 W3 O6 -124.4(11) . . . . ?
W7 O19 W3 O4 35.1(11) . . . . ?
W7 O19 W3 O32 -41(2) . . . . ?
```

```
W7 O19 W3 O14 -49.5(11) . . . . ?
W4 O6 W3 O5 -170.7(5) . . . . ?
W4 O6 W3 O19 88.6(5) . . . . ?
W4 O6 W3 O4 0.0(15) . . . . ?
W4 O6 W3 O32 -75.1(5) . . . . ?
W4 O6 W3 O14 4.3(4) . . . . ?
W2 O4 W3 O5 -123.4(11) . . . . ?
W2 O4 W3 O19 -23.5(11) . . . . ?
W2 O4 W3 O6 66.0(17) . . . . ?
W2 O4 W3 O32 140.6(11) . . . . ?
W2 O4 W3 O14 61.7(10) . . . . ?
P2 O32 W3 O5 149.6(8) . . . . ?
P2 O32 W3 O19 -34.0(19) . . . . ?
P2 O32 W3 O6 50.4(8) . . . . ?
P2 O32 W3 O4 -109.9(8) . . . . ?
P2 O32 W3 O14 -25.2(7) . . . . ?
Si1 O14 W3 O5 -175(3) . . . . ?
W4 O14 W3 O5 40(3) . . . . ?
Si1 O14 W3 O19 47.9(6) . . . . ?
W4 O14 W3 O19 -96.9(4) . . . . ?
Si1 O14 W3 O6 141.4(7) . . . . ?
W4 O14 W3 O6 -3.3(3) . . . . ?
Si1 O14 W3 O4 -40.1(6) . . . . ?
W4 O14 W3 O4 175.1(4) . . . . ?
Si1 O14 W3 O32 -129.7(6) . . . . ?
W4 O14 W3 O32 85.6(4) . . . . ?
W5 O8 W4 O7 122.6(10) . . . . ?
W5 O8 W4 O6 -59.9(17) . . . . ?
W5 O8 W4 O20 23.0(10) . . . . ?
W5 O8 W4 O33 -140.5(10) . . . . ?
W5 O8 W4 O14 -61.4(10) . . . . ?
W3 O6 W4 O7 171.6(5) . . . . ?
W3 O6 W4 O8 -5.9(15) . . . . ?
W3 O6 W4 O20 -88.4(5) . . . . ?
W3 O6 W4 O33 75.5(5) . . . . ?
W3 O6 W4 O14 -4.3(4) . . . . ?
W8 O20 W4 O7 -136.0(11) . . . . ?
W8 O20 W4 O8 -35.5(11) . . . . ?
W8 O20 W4 O6 124.6(11) . . . . ?
W8 O20 W4 O33 49(2) . . . . ?
W8 O20 W4 O14 49.5(11) . . . . ?
P2 O33 W4 O7 -150.1(8) . . . . ?
P2 O33 W4 O8 109.0(8) . . . . ?
P2 O33 W4 O6 -51.2(8) . . . . ?
P2 O33 W4 O20 24.5(19) . . . . ?
P2 O33 W4 O14 24.5(7) . . . . ?
Si1 O14 W4 O7 -178(28) . . . . ?
W3 O14 W4 O7 -33(4) . . . . ?
Si1 O14 W4 O8 38.2(6) . . . . ?
W3 O14 W4 O8 -177.2(4) . . . . ?
Si1 O14 W4 O6 -141.3(7) . . . . ?
W3 O14 W4 O6 3.3(3) . . . . ?
Si1 O14 W4 O20 -50.0(6) . . . . ?
W3 O14 W4 O20 94.6(4) . . . . ?
Si1 O14 W4 O33 130.0(7) . . . . ?
W3 O14 W4 O33 -85.4(4) . . . . ?
W8 O21 W5 O9 135.5(12) . . . . ?
W8 O21 W5 O8 35.3(12) . . . . ?
W8 O21 W5 O10 -124.2(12) . . . . ?
W8 O21 W5 O35 -40(2) . . . . ?
W8 O21 W5 O15 -49.1(11) . . . . ?
W4 O8 W5 O9 -122.9(10) . . . . ?
W4 O8 W5 O21 -23.3(10) . . . . ?
W4 O8 W5 O10 66.5(16) . . . . ?
W4 O8 W5 O35 141.8(10) . . . . ?
W4 O8 W5 O15 62.3(10) . . . . ?
```

```
W6 O10 W5 O9 -170.0(5) . . . . ?
W6 O10 W5 O21 89.6(5) . . . . ?
W6 O10 W5 O8 0.6(14) . . . . ?
W6 O10 W5 O35 -75.0(5) . . . . ?
W6 O10 W5 O15 4.9(4) . . . . ?
P3 O35 W5 O9 152.3(8) . . . . ?
P3 O35 W5 O21 -32(2) . . . . ?
P3 O35 W5 O8 -107.4(8) . . . . ?
P3 O35 W5 O10 52.9(8) . . . . ?
P3 O35 W5 O15 -22.9(7) . . . . ?
Si1 O15 W5 O9 -173(3) . . . . ?
W6 O15 W5 O9 42(4) . . . . ?
Si1 O15 W5 O21 47.7(7) . . . . ?
W6 O15 W5 O21 -97.1(4) . . . . ?
Si1 O15 W5 O8 -40.6(7) . . . . ?
W6 O15 W5 O8 174.6(4) . . . . ?
Si1 O15 W5 O10 140.9(8) . . . . ?
W6 O15 W5 O10 -3.8(3) . . . . ?
Si1 O15 W5 O35 -129.9(7) . . . . ?
W6 O15 W5 O35 85.3(4) . . . . ?
W1 O12 W6 O11 123.1(10) . . . . ?
W1 O12 W6 O22 23.5(10) . . . . ?
W1 O12 W6 O10 -55.7(18) . . . . ?
W1 O12 W6 O36 -139.7(10) . . . . ?
W1 O12 W6 O15 -60.8(10) . . . . ?
W9 O22 W6 O11 -134.9(11) . . . . ?
W9 O22 W6 O12 -34.3(11) . . . . ?
W9 O22 W6 O10 126.3(12) . . . . ?
W9 O22 W6 O36 51(2) . . . . ?
W9 O22 W6 O15 51.0(11) . . . . ?
W5 O10 W6 O11 171.0(5) . . . . ?
W5 O10 W6 O12 -10.2(15) . . . . ?
W5 O10 W6 O22 -89.4(5) . . . . ?
W5 O10 W6 O36 74.3(5) . . . . ?
W5 O10 W6 O15 -5.0(4) . . . . ?
P3 O36 W6 O11 -148.5(8) . . . . ?
P3 O36 W6 O12 110.7(8) . . . . ?
P3 O36 W6 O22 26.0(19) . . . . ?
P3 O36 W6 O10 -49.7(8) . . . . ?
P3 O36 W6 O15 25.7(7) . . . . ?
Si1 O15 W6 O11 -176(3) . . . . ?
W5 O15 W6 O11 -31(3) . . . . ?
Si1 O15 W6 O12 37.3(6) . . . . ?
W5 O15 W6 O12 -178.0(4) . . . . ?
Si1 O15 W6 O22 -51.1(6) . . . . ?
W5 O15 W6 O22 93.6(4) . . . . ?
Si1 O15 W6 O10 -140.9(7) . . . . ?
W5 O15 W6 O10 3.8(3) . . . . ?
Si1 O15 W6 O36 128.8(7) . . . . ?
W5 O15 W6 O36 -86.5(4) . . . . ?
W9 O23 W7 O24 -170.5(6) . . . . ?
W9 O23 W7 O19 12.4(14) . . . . ?
W9 O23 W7 O18 88.0(6) . . . . ?
W9 O23 W7 O25 -71.3(6) . . . . ?
W9 O23 W7 O16 1.0(5) . . . . ?
W3 O19 W7 O24 -138.5(11) . . . . ?
W3 O19 W7 O23 38.5(19) . . . . ?
W3 O19 W7 O18 -38.3(11) . . . . ?
W3 O19 W7 O25 122.2(11) . . . . ?
W3 O19 W7 O16 49.5(11) . . . . ?
W2 O18 W7 O24 138.4(11) . . . . ?
W2 O18 W7 O23 -121.8(11) . . . . ?
W2 O18 W7 O19 37.8(11) . . . . ?
W2 O18 W7 O25 -32.9(19) . . . . ?
W2 O18 W7 O16 -48.4(11) . . . . ?
W8 O25 W7 O24 171.6(6) . . . . ?
```

```
W8 O25 W7 O23 72.3(6) . . . . ?
W8 O25 W7 O19 -86.9(6) . . . . ?
W8 O25 W7 O18 -17.0(15) . . . . ?
W8 O25 W7 O16 -0.8(5) . . . . ?
Si1 O16 W7 O24 -177(2) . . . . ?
W8 O16 W7 O24 -43(3) . . . . ?
W9 O16 W7 O24 50(2) . . . . ?
Si1 O16 W7 O23 132.4(7) . . . . ?
W8 O16 W7 O23 -93.4(4) . . . . ?
W9 O16 W7 O23 -0.7(3) . . . . ?
Si1 O16 W7 O19 -43.5(6) . . . . ?
W8 O16 W7 O19 90.7(4) . . . . ?
W9 O16 W7 O19 -176.6(4) . . . . ?
Si1 O16 W7 O18 40.8(6) . . . . ?
W8 O16 W7 O18 174.9(4) . . . . ?
W9 O16 W7 O18 -92.3(4) . . . . ?
Si1 O16 W7 O25 -133.6(7) . . . . ?
W8 O16 W7 O25 0.6(4) . . . . ?
W9 O16 W7 O25 93.3(4) . . . . ?
W4 O20 W8 O26 139.5(11) . . . . ?
W4 O20 W8 O25 -121.3(11) . . . . ?
W4 O20 W8 O21 38.4(11) . . . . ?
W4 O20 W8 O27 -30.1(19) . . . . ?
W4 O20 W8 O16 -47.6(11) . . . . ?
W7 O25 W8 O26 -171.0(6) . . . . ?
W7 O25 W8 O20 87.0(6) . . . . ?
W7 O25 W8 O21 10.9(16) . . . . ?
W7 O25 W8 O27 -71.7(6) . . . . ?
W7 O25 W8 O16 0.8(5) . . . . ?
W5 O21 W8 O26 -138.9(11) . . . . ?
W5 O21 W8 O20 -38.3(11) . . . . ?
W5 O21 W8 O25 39(2) . . . . ?
W5 O21 W8 O27 121.9(12) . . . . ?
W5 O21 W8 O16 48.9(11) . . . . ?
W9 O27 W8 O26 170.6(6) . . . . ?
W9 O27 W8 O20 -19.8(15) . . . . ?
W9 O27 W8 O25 71.9(6) . . . . ?
W9 O27 W8 O21 -87.5(6) . . . . ?
W9 O27 W8 O16 -1.4(5) . . . . ?
Si1 O16 W8 O26 -180(50) . . . . ?
W9 O16 W8 O26 -45(3) . . . . ?
W7 O16 W8 O26 47(3) . . . . ?
Si1 O16 W8 O20 40.3(7) . . . . ?
W9 O16 W8 O20 174.4(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O20 -93.1(4) . . . . ?
Si1 O16 W8 O25 132.8(7) . . . . ?
W9 O16 W8 O25 -93.1(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O25 -0.6(4) . . . . ?
Si1 O16 W8 O21 -43.7(7) . . . . ?
W9 O16 W8 O21 90.5(4) . . . . ?
W7 O16 W8 O21 -177.0(4) . . . . ?
Si1 O16 W8 O27 -133.2(7) . . . . ?
W9 O16 W8 O27 1.0(3) . . . . ?
W7 O16 W8 O27 93.5(4) . . . . ?
W8 O27 W9 O28 -170.8(6) . . . . ?
W8 O27 W9 O22 87.6(6) . . . . ?
W8 O27 W9 O23 -71.7(6) . . . . ?
W8 O27 W9 O17 10.9(15) . . . . ?
W8 O27 W9 O16 1.4(5) . . . . ?
W6 O22 W9 O28 137.5(11) . . . . ?
W6 O22 W9 O27 -122.6(11) . . . . ?
W6 O22 W9 O23 -32(2) . . . . ?
W6 O22 W9 O17 37.1(11) . . . . ?
W6 O22 W9 O16 -49.3(11) . . . . ?
W7 O23 W9 O28 171.4(6) . . . . ?
W7 O23 W9 O27 71.9(6) . . . . ?
```

```
W7 O23 W9 O22 -19.3(15) . . . . ?
W7 O23 W9 O17 -87.5(6) . . . . ?
W7 O23 W9 O16 -1.0(5) . . . . ?
W1 O17 W9 O28 -137.3(11) . . . . ?
W1 O17 W9 O27 41.0(19) . . . . ?
W1 O17 W9 O22 -36.9(11) . . . . ?
W1 O17 W9 O23 123.8(11) . . . . ?
W1 O17 W9 O16 50.1(11) . . . . ?
Si1 O16 W9 O28 -179(35) . . . . ?
W8 O16 W9 O28 47(3) . . . . ?
W7 O16 W9 O28 -46(3) . . . . ?
Si1 O16 W9 O27 133.6(7) . . . . ?
W8 O16 W9 O27 -1.0(3) . . . . ?
W7 O16 W9 O27 -93.6(4) . . . . ?
Si1 O16 W9 O22 41.5(6) . . . . ?
W8 O16 W9 O22 -93.2(4) . . . . ?
W7 O16 W9 O22 174.3(4) . . . . ?
Si1 O16 W9 O23 -132.1(7) . . . . ?
W8 O16 W9 O23 93.3(4) . . . . ?
W7 O16 W9 O23 0.7(3) . . . . ?
Si1 O16 W9 O17 -43.0(6) . . . . ?
W8 O16 W9 O17 -177.6(4) . . . . ?
W7 O16 W9 O17 89.8(4) . . . . ?
O4S C43S N4S C42S -178(3) . . . . ?
O4S C43S N4S C41S 2(4) . . . . ?
C42S C41S N4S C43S -179(4) . . . . ?
Co2 O5S C53S N5S 174.1(14) . . . . ?
Co2 O5S C53S N5S 176.8(15) 2_656 . . . ?
C52S N5S C53S O5S -2(3) . . . . ?
C51S N5S C53S O5S -179.4(18) . . . . ?
C52 C51 C50 N2 -172(5) . . . . ?
C42 N2 C50 C51 60(5) . . . . ?
C46 N2 C50 C51 -49(4) . . . . ?
C38 N2 C50 C51 -180(4) . . . . ?
C43S N4S C42S C41S 179(4) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.965
_diffrn_reflns_theta_full              56.04
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.965
_refine_diff_density_max    1.999
_refine_diff_density_min   -2.167
_refine_diff_density_rms    0.214
```